

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
Escuela Superior de Física y Matemáticas

Método del Elemento Finito Aplicado a Tanques Agitados en Flujo Estable

TESIS QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO MATEMÁTICO
PRESENTA:

Daniel Castañón Quiroz

Asesores de tesis:

Dr. Adrián Alcántar Torres

Dr. Gabriel Ascanio Gasca

Reconocimientos

Agradezco profundamente a mi asesor Gabriel Ascanio Gasca del Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico (CCADET) de la UNAM, por todo el apoyo y confianza en la realización de este trabajo.

Agradezco a Guillermo Saavedra Román por haberme invitado a realizar mi tesis profesional en el CCADET. Al personal de las bibliotecas del CCADET y del CINVESTAV (México) por su excelente servicio. Asimismo, agradezco a mis padres por haberme apoyado en mis estudios y a las personas que me brindaron su amistad en la ESFM.

Esta tesis fue escrita con el apoyo del CCADET a través de una beca por el período de marzo 2006 a marzo 2007, dentro de la temática del proyecto de investigación *Mezclado Caótico en Tanques Agitados*, No. MEC-0401.

Diciembre del 2007

DANIEL CASTAÑÓN QUIROZ

Índice general

Reconocimientos	II
1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	1
1.2. Problemática	2
1.3. Objetivos	3
1.4. Hipótesis	3
1.5. Métodos Experimentales	3
1.6. Contenido	3
2. Ecuaciones de la Dinámica de Fluidos	5
2.1. Leyes de Conservación	5
2.2. Ecuación de Convección-Difusión	6
2.3. Ecuaciones de Navier-Stokes	7
2.3.1. En un Marco de Referencia Rotatorio	8
2.3.2. El Número de Reynolds	8
3. Introducción al Método del Elemento Finito	10
3.1. Espacios Continuos, Integrables y de Sobolev	11
3.2. Formulación Débil	11
3.3. El Método de Galerkin	12
3.4. Funciones Interpolantes	14
3.4.1. Elementos \mathbf{Q}_1 y \mathbf{Q}_2	15
3.4.2. Elementos \mathbf{P}_1 y \mathbf{P}_2	16
3.5. Método del Elemento Finito	17
3.6. Ensamblaje de Elementos	18
3.6.1. Transformación de Coordenadas	19
3.6.2. Integración Numérica	20
3.7. Soluciones de la Ecuación de Poisson	21
3.7.1. Difusión en un Dominio Cuadrangular	21
3.7.2. Solución con Derivadas Discontinuas	22
3.8. Ecuación de Convección-Difusión	23
3.8.1. Solución en un Dominio Cuadrangular	24
3.9. Solución de Sistemas Lineales	25

4. FEM para la Dinámica de Fluidos	27
4.1. Ecuaciones de Stokes	27
4.1.1. Formulación Débil	28
4.1.2. Aproximación Mixta de Elementos Finitos	29
4.1.3. Elementos Finitos Estables	30
4.1.4. Solución en un Dominio Semicircular	33
4.2. Ecuaciones de Navier-Stokes	35
4.2.1. Formulación Débil	35
4.2.2. Linealización	36
4.2.3. Aproximación Mixta de Elementos Finitos	37
4.2.4. Solución en una Cavidad	38
4.2.5. Solución en un Dominio Semicircular	38
5. Mezclado en Tanques Agitados y FEM	40
5.1. Técnicas Experimentales de Visualización	41
5.2. Modelo Matemático	41
5.3. Simulación por FEM	44
5.4. PIV y Validación de Resultados	46
5.5. Conclusiones	48

Capítulo 1

Introducción

1.1. Antecedentes

El término “mezclado” es aplicado al proceso utilizado en reducir el grado de no uniformidad, lo cual se logra moviendo un material de una región a otra. Sin embargo, el mezclado también se utiliza para conducir transferir calor, transferir masa y para llevar a cabo reacciones químicas.

El proceso de mezclado en tanques agitados es una de las operaciones más comunes en los procesos químicos, petroquímicos y farmacéuticos. Principalmente se usa para mezclar líquidos. Dicha operación se lleva a cabo comúnmente con un impulsor centrado con respecto al tanque, y girando en un solo sentido sobre su propio eje (ver figura 1.1). Este impulsor contiene hélices (o paletas) para mezclar el fluido. Todos los procesos que incluyen la fermentación (Tatterson [31]) como la producción de penicilina, cerveza, yoghurt, etc, son aplicaciones que utilizan el mezclado en tanques agitados.

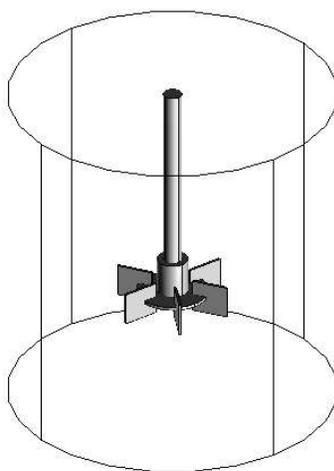


Figura 1.1: Configuración tradicional de un experimento de mezclado en tanques agitados.

Por otra parte, el mezclado en tanques agitados consume una cantidad considerable de tiempo y energía en un proceso. Así, la determinación óptima del tiempo de mezclado es fundamental para evitar operaciones sobremezcladas, operaciones sin la uniformidad deseada, pérdidas en tiempo, pérdidas económicas y pérdidas en consumo de potencia.

1.2. Problemática

El mezclado de fluidos se puede llevar a cabo en régimen laminar y/o régimen turbulento, para lo cual se calcula el número de Reynolds del experimento, siendo la velocidad angular del impulsor y la viscosidad del fluido determinantes.

El régimen turbulento se caracteriza por velocidades muy grandes y/o viscosidades muy pequeñas, aquí el número de Reynolds es grande (comúnmente mayor que 5000). En este régimen la velocidad y otras propiedades del fluido varían de forma aleatoria, aún cuando las condiciones de fronteras no varían con el tiempo (Versteeg y Malalasekera [32]). Debido a que existe más velocidad y menos resistencia del fluido, en este régimen el mezclado se logrará en menor tiempo. Sin embargo, en algunas aplicaciones es impráctico un mezclado en régimen turbulento, por ejemplo, en biotecnología los organismos encargados de la fermentación pueden ser sensibles a la alta cantidad de fuerza inercial generado por la velocidad angular del impulsor.

A bajos números de Reynolds se encuentra el régimen laminar, donde las fuerzas viscosas predominan sobre las fuerzas inerciales. Este régimen se caracteriza por tener líneas de flujo suaves y adyacentes entre ellas, en contraste con el fluido turbulento. En la configuración tradicional, donde el impulsor se encuentra centrado con respecto al tanque, se generan (Lamberto *et al.* [20]) bajo ciertas condiciones, zonas bien mezcladas cerca del impulsor, contariamente a las zonas lejanas de él, se encuentran muertas o segregadas; el fluido se encuentra en movimiento, pero no lo suficiente para mezclarse con la región ya homogénea. Así, existe una clara separación, en unas partes el material ya está bien mezclado, pero en otras partes no. Esto se debe a que las fuerzas viscosas, las cuales predominan, disipan las fuerzas inerciales producidas por el impulsor. Por lo tanto, se requieren tiempos de mezclado muy grandes e incluso infinitos.

Esto presenta una gran desventaja del mezclado laminar en condiciones simétricas. En contraste, en el régimen turbulento las fuerzas disipativas tienen poca influencia, logrando una uniformidad deseada del material; este régimen se logra aumentando la velocidad angular del impulsor, pero como se mencionó anteriormente, el mezclado en régimen turbulento no es práctico para ciertas aplicaciones industriales.

Recientemente, se han estudiado experimentalmente configuraciones no tradicionales para el mezclado laminar, por ejemplo, en Alvarez *et al.* [1] se estudia el propulsor en posición asimétrica, en Lamberto *et al.* [19] variaciones de la velocidad angular con respecto al tiempo y el propulsor en posición simétrica, y en Ascanio *et al.* [3] configuraciones no convencionales utilizando varios propulsores. Todas estas configuraciones han tenido éxito en evitar zonas segregadas y lograr un mezclado totalmente homogéneo en tiempos relativamente cortos.

Para el análisis en tanques agitados se emplean metodologías experimentales y/o metodologías computacionales. Las metodologías computacionales o *simulación*, es el uso de equipo computacional para resolver numéricamente un modelo matemático que aproxima un sistema físico, en este caso un experimento en tanques agitados. El uso de computadoras es necesario porque el modelo matemático no es posible resolverlo por métodos analíticos. Los modelos matemáticos pueden ser continuos o discretos, probabilísticos o determinísticos y dinámicos o estáticos. Uno de los métodos más usado para resolver modelos continuos tanto determinísticos como probabilísticos, es el método del elemento finito (FEM por sus siglas en inglés). La principal ventaja del método es simular experimentos sin realizarlos físicamente. Y la principal desventaja, es el tiempo de cómputo requerido para resolver el modelo, por eso, hoy en día es campo de la investigación en FEM acelerar la convergencia hacia la solución del modelo.

1.3. Objetivos

El objetivo de esta tesis es analizar numéricamente el proceso de mezclado en régimen laminar en condiciones de flujo estable, utilizando el método del elemento finito, para obtener y visualizar los campos de velocidades de flujo dentro del tanque.

1.4. Hipótesis

El proceso de mezclado en condiciones de flujo estable es posible analizarlo mediante un modelo continuo, determinístico y en el que las velocidades y la presión se suponen independientes del tiempo.

1.5. Métodos Experimentales

Se menciona la técnica experimental de Velocimetría de Partículas por Imágenes (PIV por sus siglas en inglés), en la cual se obtienen campos de velocidad de forma cuantitativa. Esta técnica es empleada para validar los resultados numéricos de una simulación en tanques agitados.

1.6. Contenido

El segundo capítulo se centra en la modelación de los fenómenos de convección, difusión y la modelación de la dinámica de fluidos, esto es; las ecuaciones de Stokes y de Navier-Stokes. En el tercer capítulo se presenta el método del elemento finito. Se introducen distintos elementos finitos, la formulación débil y la aproximación de Galerkin tanto para la ecuación de difusión, como para la ecuación de convección-difusión. FEM para la dinámica de fluidos y métodos de solución para sistemas no lineales se tratan en el cuarto capítulo. El quinto capítulo se presenta la aplicación del método del elemento finito al mezclado en tanques agitados. Se mencionan

técnicas experimentales para la visualización de trayectorias de flujo y la obtención de datos cuantitativos del campo de velocidad a través de PIV.

Capítulo 2

Ecuaciones de la Dinámica de Fluidos

2.1. Leyes de Conservación

Las leyes de la dinámica de fluidos se pueden derivar de distintas formas, las cuales son matemáticamente equivalentes. Una de ellas es a través de las leyes de conservación (ver Hirsch [14]). Ésta nos indica, que durante la evolución de un fluido ciertas propiedades, como la masa, el momento lineal y la energía se conservan.

Para ilustrar las leyes de conservación, consideremos un fluido en movimiento tridimensional, sea su velocidad $\vec{u}(\vec{x}, t)$ con componentes cartesianas

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = (u, v, w). \quad (2.1)$$

Sea $\phi(\vec{x}, t)$ una cantidad escalar por unidad de volumen, por ejemplo la densidad de un colorante dentro del fluido. Denotemos por ∂D la superficie que encierra un volumen $D \subset \Omega$, así la cantidad total del colorante en un volumen es $\int_D \phi d\Omega$, donde $d\Omega = dx dy dz$ es el elemento de volumen. Denotemos por $\vec{F}(\vec{x}, t)$ los flujos de ϕ saliendo del volumen D a través de ∂D . Supongamos que ϕ no es creada ni destruida dentro de un volumen, entonces la ley de conservación dice que la variación por unidad de tiempo del escalar ϕ dentro del volumen D es igual a la cantidad de los flujos en D a través de ∂D , es decir,

$$\frac{d}{dt} \int_D \phi d\Omega = - \int_{\partial D} \vec{F} \cdot \vec{n} dS, \quad (2.2)$$

donde \vec{n} es la normal unitaria de ∂D apuntando hacia afuera del volumen y dS es el elemento de área en la superficie. Si consideramos a \vec{F} como un campo vectorial con derivadas continuas, podemos aplicar el teorema de divergencia a la integral de superficie, ver [6],

$$\frac{d}{dt} \int_D \phi d\Omega = - \int_D \nabla \cdot \vec{F} d\Omega, \quad (2.3)$$

ya que D es un volumen cualquiera, se tiene

$$\frac{d\phi}{dt} + \nabla \cdot \vec{F} = 0 \quad \text{en } \Omega.$$

Si ahora consideramos que dentro del volumen existe una fuente o pérdida $f(\vec{x}, t)$ por unidad de volumen, se tiene en la ecuación anterior

$$\frac{d\phi}{dt} + \nabla \cdot \vec{F} = f \quad \text{en } \Omega. \quad (2.4)$$

En esta tesis se supondrá que la velocidad y las propiedades del fluido son estacionarias, es decir;

$$\vec{u} = \vec{u}(x, y, z),$$

y

$$\frac{d\phi}{dt} = 0,$$

así en la ecuación (2.4) se tiene

$$\nabla \cdot \vec{F} = f \quad \text{en } \Omega. \quad (2.5)$$

2.2. Ecuación de Convección-Difusión

Separaremos el flujo \vec{F} en dos componentes \vec{F}_C y \vec{F}_D . La parte convectiva \vec{F}_C es la cantidad ϕ transportada por el fluido a una velocidad \vec{u} , esto es,

$$\vec{F}_C = \phi \vec{u},$$

entonces a (2.5) se le conoce como la *ecuación de convección*

$$\nabla \cdot (\phi \vec{u}) = f \quad \text{en } \Omega. \quad (2.6)$$

La componente difusiva \vec{F}_D , modela el cambio de ϕ debido a diferencias en regiones adyacentes. En ciertas condiciones esto se puede modelar a través de la ley de Fick¹:

$$\vec{F}_D = -\kappa \nabla \phi,$$

donde $\kappa > 0$ y puede ser una función, sin embargo, aquí la supondremos siempre constante. Considerando sólo la componente difusiva en (2.5), tenemos la *ecuación de difusión* también conocida como la *ecuación de Poisson*

$$-\kappa \nabla^2 \phi = f \quad \text{en } \Omega, \quad (2.7)$$

¹Véase Hirsch [14].

finalmente sumando las contribuciones \vec{F}_C y \vec{F}_D , tenemos la *ecuación de convección-difusión*

$$-\kappa \nabla^2 \phi + \nabla \cdot (\phi \vec{u}) = f \quad \text{en } \Omega. \quad (2.8)$$

2.3. Ecuaciones de Navier-Stokes

Si consideramos a ϕ como la densidad del fluido ρ , la cual no es creada ni destruida, es decir, $f = 0$, entonces a la ecuación de convección se le conoce como la *ecuación de continuidad*

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad \text{en } \Omega,$$

un fluido es incompresible si su densidad es constante, así se tiene que

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad \text{en } \Omega. \quad (2.9)$$

Similarmente siguiendo este principio de conservación para campos vectoriales (veáse Hirsch[14]), se obtiene la *ecuación del momento lineal*

$$-\nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p = \vec{f} \quad \text{en } \Omega, \quad (2.10)$$

donde ν es la viscosidad dinámica del fluido, esto es, $\nu = \frac{\mu}{\rho}$, p la presión y \vec{f} representa las fuerzas externas aplicadas al fluido como la gravedad. El término $\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}$ representa las fuerzas inerciales o convectivas, y $\nabla^2 \vec{u}$ las fuerzas viscosas sobre el fluido. Es importante resaltar que esta ecuación sólo es válida para fluidos *newtonianos*, los cuales tienen viscosidad μ constante [30].

A la ecuación de continuidad y la del momento, juntas se les conoce como las ecuaciones de *Navier-Stokes*

$$\begin{aligned} -\nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} + \nabla p &= \vec{f} & \text{en } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{u} &= 0 & \text{en } \Omega. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Donde la densidad constante ha sido absorbida por la presión ($p \leftarrow \frac{p}{\rho}$). Un caso especial de estas ecuaciones es considerar que la fuerzas viscosas predominan fuertemente sobre las convectivas, es decir, $(\vec{u} \nabla \cdot) \vec{u} = 0$, así

$$\begin{aligned} -\nu \nabla^2 \vec{u} + \nabla p &= \vec{f} & \text{en } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{u} &= 0 & \text{en } \Omega, \end{aligned} \quad (2.12)$$

a éstas se les conoce como las ecuaciones de *Stokes*.

2.3.1. En un Marco de Referencia Rotatorio

Para la simulación en el mezclado en tanques agitados, se consideran las ecuaciones Navier-Stokes pero tomando en cuenta un marco de referencia móvil, en particular; un marco de referencia rotatorio con velocidad angular constante $\vec{\omega}$, entonces las ecuaciones de Navier-Stokes resultan (ver Batchelor [4] y Hirsch [14]),

$$\begin{aligned} \vec{w} \cdot \nabla \vec{w} - \nu \nabla^2 \vec{w} + \nabla p &= \vec{f} - \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) - 2(\vec{\omega} \times \vec{w}) & \text{en } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{w} &= 0 & \text{en } \Omega. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Donde \vec{w} es la velocidad con respecto al marco móvil y $\vec{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$. El término $-\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r})$ es la fuerza centrípeta y el término $-2(\vec{\omega} \times \vec{w})$ se le conoce como *la fuerza de Coriolis*. Para obtener la velocidad \vec{u} con respecto al marco inercial (fijo), se emplea

$$\vec{u} = \vec{w} + \vec{\omega} \times \vec{r}. \quad (2.14)$$

En esta tesis siempre se trabajará con el caso particular de

$$\vec{\omega} = \omega \mathbf{k},$$

siendo $\vec{f} = (f_x, f_y, f_z)$ y $\vec{w} = (w_x, w_y, w_z)$ las ecuaciones (2.10) se reducen a

$$\begin{aligned} -\nu \nabla^2 w_x + \vec{w} \cdot \nabla w_x - 2\omega w_y + \frac{\partial p}{\partial x} &= f_x - \omega^2 x \\ -\nu \nabla^2 w_y + \vec{w} \cdot \nabla w_y + 2\omega w_x + \frac{\partial p}{\partial y} &= f_y - \omega^2 y \\ -\nu \nabla^2 w_z + \vec{w} \cdot \nabla w_z + \frac{\partial p}{\partial z} &= f_z \\ \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

2.3.2. El Número de Reynolds

Se introduce el parámetro de referencia de longitud L y también la velocidad de referencia V_∞ . Si definimos a $x_* = \frac{x}{L}$, $y_* = \frac{y}{L}$, $z_* = \frac{z}{L}$ y $\vec{u}_* = \frac{1}{V_\infty} \vec{u}$. Se tienen las ecuaciones de Navier-Stokes en forma adimensional (ver [10] y [30]),

$$\begin{aligned} \vec{u}_* \cdot \nabla \vec{u}_* - \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{u}_* + \nabla p_* &= \frac{L}{V_\infty^2} \vec{f} \\ \nabla \cdot \vec{u}_* &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde $p = L^2 p_*$ y Re se define como el *número de Reynolds*:

$$Re = \frac{\rho V_\infty L}{\mu}, \quad (2.17)$$

si $p = (\nu V_\infty)p_*$ se tiene la forma adimensional

$$\begin{aligned} Re(\vec{u}_* \cdot \nabla \vec{u}_*) - \nabla^2 \vec{u}_* + \nabla p_* &= Re \frac{V_\infty}{L} \vec{f} \\ \nabla \cdot \vec{u}_* &= 0 \end{aligned} \quad (2.18)$$

así que a grandes números de Reynolds, las fuerzas inerciales dominan, mientras que a pequeños números de Reynolds, las fuerzas viscosas dominan. Para $Re \rightarrow 0$ las ecuaciones (2.18) se reducen a las ecuaciones de Stokes y entonces se modela un flujo *lento*.

Para las ecuaciones de Navier-Stokes en un sistema de referencia rotatorio, introducimos el parámetro de longitud D y definimos $x_* = \frac{x}{D}$, $y_* = \frac{y}{D}$, $z_* = \frac{z}{D}$ y $\vec{w}_* = \frac{1}{D\omega} \vec{w}$, las ecuaciones (2.11) tienen la forma adimensional

$$\begin{aligned} -\nabla^2 w_{*x} + Re(\vec{w}_* \cdot \nabla w_{*x}) - 2Re(w_{*y}) + \frac{\partial p_*}{\partial x_*} &= \frac{D}{\nu\omega}(f_x + \omega^2 x) \\ -\nabla^2 w_{*y} + Re(\vec{w}_* \cdot \nabla w_{*y}) + 2Re(w_{*x}) + \frac{\partial p_*}{\partial y_*} &= \frac{D}{\nu\omega}(f_y + \omega^2 y) \\ -\nabla^2 w_{*z} + Re(\vec{w}_* \cdot \nabla w_{*z}) + \frac{\partial p_*}{\partial z_*} &= \frac{D}{\nu\omega} f_z \\ \frac{\partial w_{*x}}{\partial x_*} + \frac{\partial w_{*y}}{\partial y_*} + \frac{\partial w_{*z}}{\partial z_*} &= 0, \end{aligned} \quad (2.19)$$

en donde ahora el número de Reynolds, para ω en rps, se define como (ver Tatterson[31])

$$Re = \frac{\rho\omega D^2}{\mu}. \quad (2.20)$$

Capítulo 3

Introducción al Método del Elemento Finito

El método del elemento finito (FEM) aproxima la solución analítica de una ecuación diferencial parcial, como alguna de las presentadas en el capítulo anterior. Sin embargo, esta aproximación se construye de tal forma que tiene derivadas discontinuas, por lo tanto es necesario convertir la ecuación diferencial parcial a una ecuación integrodiferencial, la cual admite soluciones con derivadas discontinuas, entre otras propiedades. Por ejemplo, consideremos la ecuación de Poisson (2.7)

$$-\nabla^2 u = f \quad \text{en } \Omega, \quad (3.1)$$

donde u es un escalar, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ó \mathbb{R}^3 . La solución u de esta ecuación también debe satisfacer condiciones en la frontera $\partial\Omega$, por ejemplo

$$\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial n} = g \quad \text{en } \partial\Omega, \quad (3.2)$$

donde $\frac{\partial u}{\partial n}$ es la derivada direccional con dirección al vector normal $\partial\Omega$, α y β son constantes. La combinación de (3.1) con (3.2) se le conoce como *problema de valores en la frontera*. Si $\beta = 0$ tenemos una condición de *Dirichlet* y si $\alpha = 0$ tenemos una condición de *Neumann*.

Ahora, se dice que u es una *solución clásica*¹ si tiene derivadas de segundo orden continuas, es decir $u \in C^2(\Omega)$. Sin embargo, si f es discontinua la solución de (3.1) no es clásica, la solución aproximada por FEM tampoco es solución clásica, y por último; si f es continua pero el dominio Ω no cumple ciertas condiciones, u puede no tener segundas derivadas continuas. Así que se debe modificar la ecuación (3.1) para permitir estos casos. Primero se definen algunos espacios dentro de los cuales están las funciones con derivadas discontinuas.

¹Véase Oden y Carey [22].

3.1. Espacios Continuos, Integrables y de Sobolev

Denotemos por $C^n(\Omega)$ el espacio de funciones con derivadas de grado n continuas. Por ejemplo $C^0(\Omega)$ es el espacio de funciones continuas, $C^2(\Omega)$ con segundas derivadas continuas, etc.

Denotemos por $L_2(\Omega)$ el espacio de funciones cuadrado integrable² en Ω , es decir,

$$L_2(\Omega) = \left\{ u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} u^2 < \infty \right\},$$

y el espacio de *Sobolev* $H^1(\Omega)$, las funciones que tienen derivadas hasta grado uno, las cuales son cuadrado integrables, es decir,

$$H^1(\Omega) = \left\{ u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z} \in L_2(\Omega) \right\}.$$

Se observa que algunas funciones discontinuas se encuentran en $L_2(\Omega)$, y algunas funciones con derivadas discontinuas se encuentren en $H^1(\Omega)$. Los espacios $L_2(\Omega)$ y $H^1(\Omega)$ son fundamentales para el estudio y justificación del método del elemento finito (veáse Oden y Reddy [23]).

3.2. Formulación Débil

Para convertir la ecuación diferencial (3.1) a una ecuación integrodiferencial, sea v una función y multipliquemos e integremos (3.1) de tal manera que

$$\int_{\Omega} (\nabla^2 u + f)v = 0. \quad (3.3)$$

Si u es una solución clásica, (3.3) se satisface. Supongamos que v es suave³ en Ω de tal forma que es posible aplicar la regla del producto $\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v$ (ver Borisenko y Tarapov [6]),

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} v \nabla^2 u &= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v - \int_{\Omega} \nabla \cdot (v \nabla u) \\ &= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v - \int_{\partial \Omega} v \frac{\partial u}{\partial n}, \end{aligned}$$

así,

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} v f + \int_{\partial \Omega} v \frac{\partial u}{\partial n}, \quad (3.4)$$

a esta última ecuación se le conoce como *la formulación débil* de (3.1). Se observa que en la formulación débil sólo se exigen derivadas de primer orden, es decir, $u \in H^1(\Omega)$, por otra parte sólo se impuso la restricción de que v sea suave, sin embargo; esta restricción se puede debilitar

²En el sentido de Lebesgue.

³ $v \in C^1(\Omega)$.

[23].

Entonces por una parte tenemos la formulación clásica:

Encontrar u tal que

$$-\nabla^2 u = f \quad \text{en } \Omega \tag{3.5}$$

$$u = g_D \quad \text{en } \partial\Omega_D \quad \text{y} \quad \frac{\partial u}{\partial n} = g_N \quad \text{en } \partial\Omega_N \tag{3.6}$$

donde $\partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N = \partial\Omega$ y $\partial\Omega_D$ y $\partial\Omega_N$ son distintos.

Suponemos siempre que existe por lo menos una condición Dirichlet, es decir; $\int_{\partial\Omega_D} ds \neq 0$.
 Ahora definimos el espacio *solución* y el espacio de *prueba* como sigue

$$H_E^1 = \{u \in H^1(\Omega) \mid u = g_D \quad \text{en } \partial\Omega_D\}, \tag{3.7}$$

$$H_{E_0}^1 = \{v \in H^1(\Omega) \mid v = 0 \quad \text{en } \partial\Omega_D\}, \tag{3.8}$$

así tenemos la formulación débil:

Encontrar $u \in H_E^1$ tal que

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} v f + \int_{\partial\Omega} v g_N \quad \text{para todo } v \in H_{E_0}^1. \tag{3.9}$$

Se observa que se ha reemplazado el término $\frac{\partial u}{\partial n}$ por g_N que es exactamente la condición de Neumann en $\partial\Omega_N$.

En resumen, una solución de la formulación clásica debe ser dos veces diferenciable, mientras que una solución de la formulación débil sólo debe tener primeras derivadas cuadrado integrables, las cuales pueden ser continuas o discontinuas, así que se ha ampliado el espacio solución. Y si u es solución débil y tiene segundas derivadas continuas, también es solución de la formulación clásica, en cambio una solución clásica siempre es solución débil.

3.3. El Método de Galerkin

Se comienza a construir una aproximación de la solución de la formulación débil (3.9), aproximando el espacio de prueba $H_{E_0}^1$ por el espacio n -dimensional S_0^h , el cual cumple que $S_0^h \subset H_{E_0}^1$. Sea $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n\}$ una base de S_0^h , esto es, para una función $v_h \in S_0^h$, existe $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^n$, donde $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n)^T$, tal que

$$v_h = \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_j \phi_j.$$

Para aproximar el espacio solución H_E^1 , definamos funciones adicionales $\{\phi_{n+1}, \phi_{n+2}, \dots, \phi_{n+n_\partial}\}$ y los coeficientes \mathbf{u}_j , $j = n+1, \dots, n+n_\partial$, tales que la función $\sum_{j=n+1}^{n+n_\partial} \mathbf{u}_j \phi_j$ interpole g_D en la frontera $\partial\Omega_D$. Finalmente para $u_h \in S_E^h \subset H_E^1$, asociemos el vector $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n)^T$ para definir la expansión

$$u_h = \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \phi_j + \sum_{j=n+1}^{n+n_\partial} \mathbf{u}_j \phi_j. \quad (3.10)$$

Las funciones ϕ_i se les conoce como *funciones de forma*. Los coeficientes $(\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{u}_{n+2}, \dots, \mathbf{u}_{n+n_\partial})^T$, son tales que modelan las condiciones de Dirichlet en la frontera. Así que la forma de definir la expansión en (3.10) automáticamente se satisfacen las condiciones de Dirichlet (3.7). Las funciones $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n\}$ sirven de base tanto para S_0^h y S_E^h , a esta aproximación se le conoce como *aproximación de Galerkin*. Existen otras aproximaciones en las cuales se pueden usar bases distintas para aproximar S_0^h y S_E^h , a éstas se les conoce como *aproximación de Petrov-Galerkin*, las cuales son ampliamente usadas para resolver la ecuación de convección (2.8), véase Heinrich y Pepper[12].

Empleando la aproximación de Galerkin, la formulación débil (3.9) queda de la siguiente manera: encontrar $u_h \in S_E^h$ tal que

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v_h = \int_{\Omega} v_h f + \int_{\partial\Omega} v_h g_N \quad \text{para todo } v_h \in S_0^h. \quad (3.11)$$

Lo cual es equivalente a encontrar \mathbf{u}_j , $j = 1, \dots, n$ tal que

$$\sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \int_{\Omega} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i = \int_{\Omega} \phi_i f + \int_{\partial\Omega} \phi_i g_N - \sum_{j=n+1}^{n+n_\partial} \mathbf{u}_j \int_{\partial\Omega} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \quad (3.12)$$

para $i = 1, \dots, n$. Esto puede escribirse de forma matricial como

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (3.13)$$

donde

$$\mathbf{A} = [a_{ij}], \quad a_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \quad (3.14)$$

y

$$\mathbf{f} = [\mathbf{f}_i], \quad \mathbf{f}_i = \int_{\Omega} \phi_i f + \int_{\partial\Omega} \phi_i g_N - \sum_{j=n+1}^{n+n_\partial} \mathbf{u}_j \int_{\partial\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j. \quad (3.15)$$

3.4. Funciones Interpolantes

Ahora se presenta cómo el método del elemento finito aproxima un dominio Ω , sin embargo, sin pérdida de generalidad en lo que resta de este capítulo supondremos que $\Omega \subset \mathbf{R}^2$, a menos que se diga explícitamente lo contrario. Se divide el dominio Ω en elementos (subdominios) Ω^e , tales que

$$\cup_e \Omega^e = \Omega,$$

por ejemplo la figura (3.1) muestra un dominio circular dividido en rectángulos y al lado se muestra el mismo dominio dividido en triángulos. Véase Carey [9] para profundizar sobre los algoritmos para la división de dominios. Para esta división es conveniente introducir una transformación que asocie un punto (ξ, η) del dominio unitario $\hat{\Omega}$ con un punto (x, y) para cada elemento Ω^e , es decir,

$$x = \sum_{j=1}^m x_j^e \hat{\phi}_j^e(\xi, \eta), \quad y = \sum_{j=1}^m y_j^e \hat{\phi}_j^e(\xi, \eta), \tag{3.16}$$

donde m es el número de vértices (x_j^e, y_j^e) que forman el elemento Ω^e . La figura (3.2) ilustra este concepto. Las funciones $\hat{\phi}_j^e$ se les conoce como funciones de *forma* o de *interpolación*, las cuales pueden ser tanto lineales como no lineales.

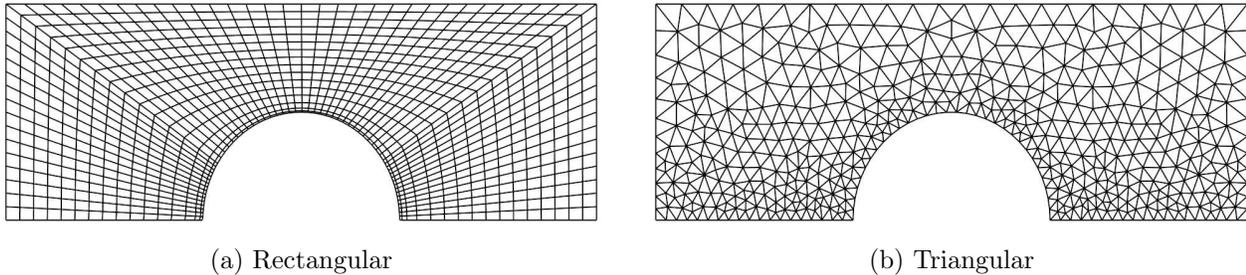


Figura 3.1: División en elementos de Ω .

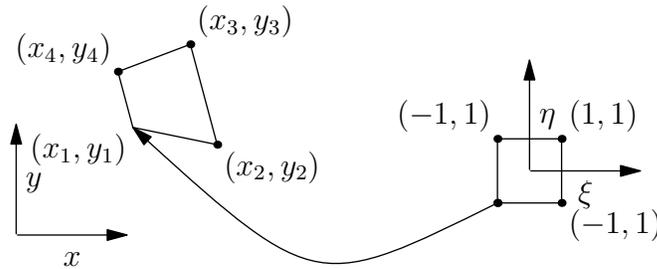


Figura 3.2: Mapeo del dominio $\hat{\Omega}$ a Ω .

3.4.1. Elementos \mathbf{Q}_1 y \mathbf{Q}_2

Los elementos \mathbf{Q}_1 y \mathbf{Q}_2 son rectangulares. En \mathbf{R}^2 el elemento \mathbf{Q}_1 tiene cuatro vértices. Sus funciones de forma son:

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_1 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\ \hat{\phi}_2 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\ \hat{\phi}_3 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \\ \hat{\phi}_4 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta)\end{aligned}$$

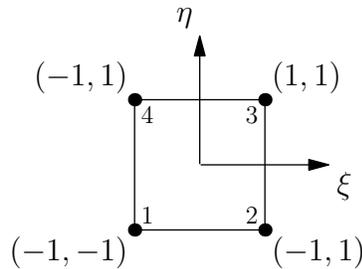


Figura 3.3: Elemento \mathbf{Q}_1 en \mathbf{R}^2 .

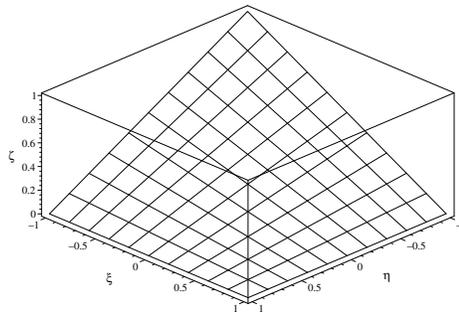


Figura 3.4: Función $\hat{\phi}_1$ de \mathbf{Q}_1 .

El elemento \mathbf{Q}_2 en \mathbf{R}^2 tiene nueve vértices. Sus funciones de forma son,

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_1 &= \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 - \eta) & \hat{\phi}_5 &= \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(\eta^2 - \eta) \\ \hat{\phi}_2 &= \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 - \eta) & \hat{\phi}_6 &= \frac{1}{2}(\xi^2 + \xi)(1 - \eta^2) \\ \hat{\phi}_3 &= \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 + \eta) & \hat{\phi}_7 &= \frac{1}{4}(1 - \xi^2)(\eta^2 + \eta) \\ \hat{\phi}_4 &= \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 + \eta) & \hat{\phi}_8 &= \frac{1}{2}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 - \eta) \\ \hat{\phi}_9 &= (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)\end{aligned}$$

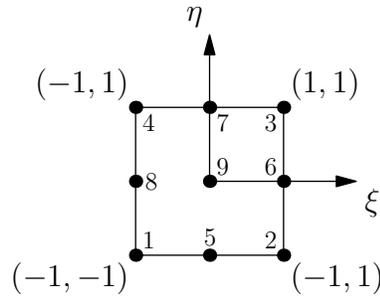


Figura 3.5: Elemento \mathbf{Q}_2 en \mathbf{R}^2 .

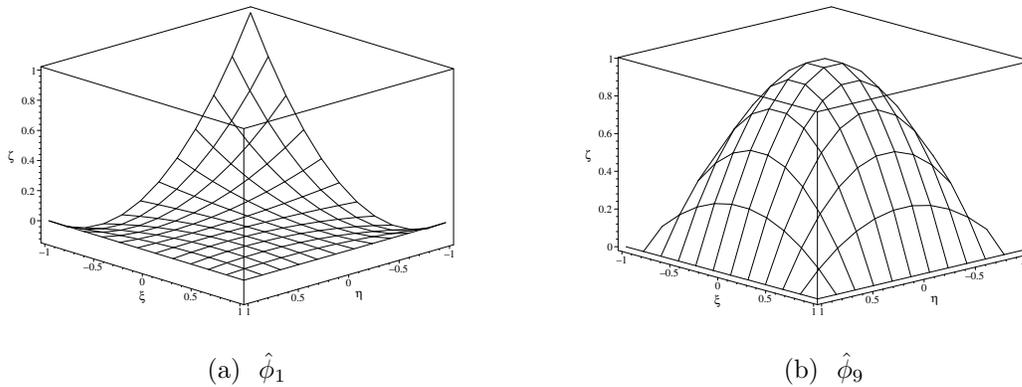


Figura 3.6: Funciones de \mathbf{Q}_2 .

En \mathbf{R}^3 , \mathbf{Q}_1 tiene ocho vértices (figura 3.7), mientras que \mathbf{Q}_2 veintisiete. En [15] se encuentran las funciones de forma.

3.4.2. Elementos \mathbf{P}_1 y \mathbf{P}_2

En \mathbf{R}^2 los elementos \mathbf{P}_1 y \mathbf{P}_2 son triangulares, tienen tres y seis vértices respectivamente.

En \mathbf{R}^3 los elementos son tetraedros, \mathbf{P}_1 tiene cuatro vértices y \mathbf{P}_2 diez vértices (ver figura 3.9).

Observaciones

- 1) En todos los elementos anteriores se tiene que $\hat{\phi}_j = 1$ para un vértice y es igual cero en todo los demás vértices, por ejemplo $\hat{\phi}_1(-1, 1) = 1$ en \mathbf{Q}_1 . A esta propiedad se le conoce como *propiedad de interpolación*.
- 2) Todos los elementos tienen funciones continuas.

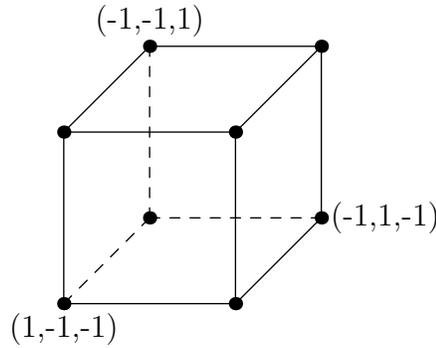


Figura 3.7: Elemento \mathbf{Q}_1 en \mathbf{R}^3 .

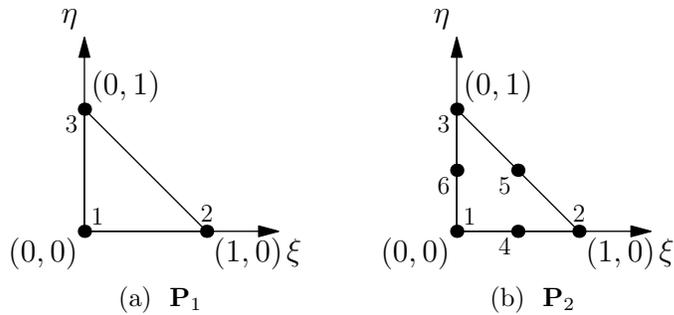


Figura 3.8: Elementos triangulares en \mathbf{R}^2 .

3.5. Método del Elemento Finito

Recordemos que en el método de Galerkin aproximamos u_h por medio de las funciones base ϕ_j , es decir,

$$u_h = \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \phi_j + \sum_{j=n+1}^{n+n_\partial} \mathbf{u}_j \phi_j.$$

Las funciones ϕ_j también pueden ser elementos \mathbf{Q} o \mathbf{P} . Para esto, sigamos considerando que Ω es dividido en elementos Ω^e y dentro de cada elemento aproximamos $u_h(x, y)$ con

$$u_h(x, y) = \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \phi_j^e \quad \text{en } \Omega^e, \tag{3.17}$$

donde ahora n es el número de vértices con los que se quiere aproximar u_h en el elemento Ω^e . Observe que denotamos con $\hat{\phi}_j^e$ los elementos que dividen el dominio, mientras que denotamos con ϕ_j^e a las funciones que aproximan a u_h dentro del elemento. Comúnmente los vértices de ϕ_j^e coinciden con los vértices de $\hat{\phi}_j^e$, esto es $m = n$ en todo Ω^e (véase Reddy [26] para $n > m$). Obsérvese también que $u_h = \mathbf{u}_j$ en los vértices, debido a la propiedad de interpolación.

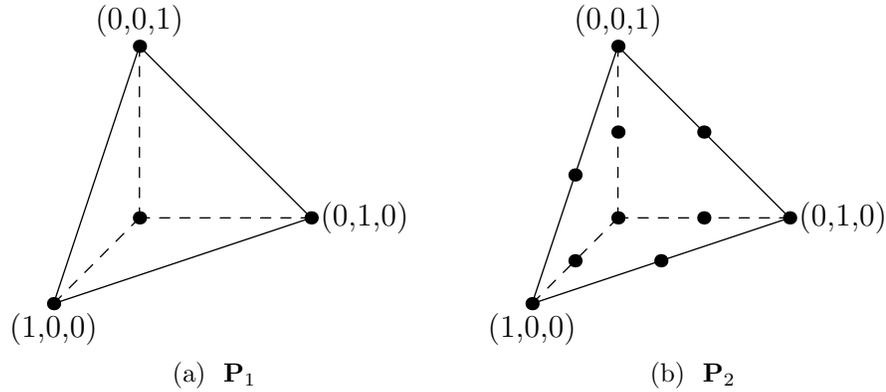


Figura 3.9: Elementos tetraédricos en \mathbf{R}^3 .

Para evaluar a u_h en los ejes (y caras en 3D) que unen a los elementos se imponen restricciones de continuidad en los vértices que comparten los elementos (ver [26] y [15]). Así que u_h y v_h son continuas en todo Ω , pero con derivadas discontinuas en puntos y ejes de unión. En la figura (3.10) se muestran cuatro elementos \mathbf{Q}_1 en \mathbf{R}^2 que aproximan a u_h en un punto de unión \mathbf{u} .

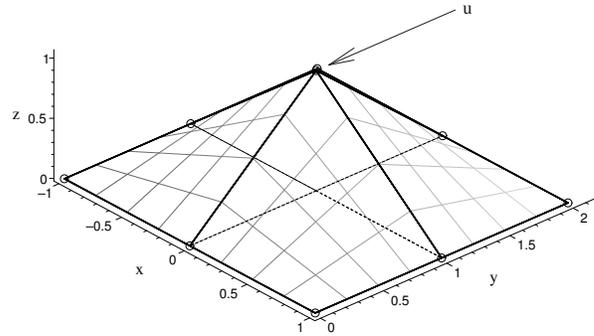


Figura 3.10: Ensamblaje de elementos \mathbf{Q}_1

3.6. Ensamblaje de Elementos

Para obtener las entradas $[a_{ij}]$ del sistema (3.13),

$$a_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j$$

la integral se evalúa para cada elemento Ω^e , obteniendo así a_{ij}^e , esta contribución se suma a

a_{ij} imponiendo la restricción de continuidad en los vértices; a este proceso se le conoce como *ensamblaje de elementos* (ver Hughes [15]),

$$\begin{aligned}
 a_{ij} &= \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \\
 &= \sum_{\Omega^e \in \Gamma_j} \int_{\Omega^e} \nabla \phi_i^e \cdot \nabla \phi_j^e \\
 &= \sum_{\Omega^e \in \Gamma_j} a_{ij}^e,
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

donde Γ_j denota al conjunto de elementos Ω^e que tiene en común al vértice \mathbf{u}_j .

3.6.1. Transformación de Coordenadas

Para evaluar la integral

$$\int_{\Omega^e} \nabla \phi_i^e \cdot \nabla \phi_j^e, \tag{3.19}$$

comencemos expresando las derivadas ϕ_j^e en términos de las coordenadas (ξ, η) del dominio unitario $\hat{\Omega}$ utilizando la regla de la cadena, esto es,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \phi^e}{\partial \xi} &= \frac{\partial \phi^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial \phi^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\
 \frac{\partial \phi^e}{\partial \eta} &= \frac{\partial \phi^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial \phi^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta}
 \end{aligned}$$

o en forma matricial,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \phi^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix}^e \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi^e}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi^e}{\partial y} \end{bmatrix} \tag{3.20}$$

a esta matriz se le conoce como el *jacobiano* de la transformación

$$[\mathcal{J}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix}^e. \tag{3.21}$$

Sin embargo, en la expresión (3.19) es necesario tener $\frac{\partial \phi^e}{\partial x}$ y $\frac{\partial \phi^e}{\partial y}$, para esto se invierte el jacobiano,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \phi^e}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi^e}{\partial y} \end{bmatrix} = [\mathcal{J}]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

de aquí que es necesario que la matriz jacobiana sea no singular. También se requiere que el determinante de la inversa sea positivo (véase Reddy [26]).

Para obtener el jacobiano se utiliza la transformación (3.16),

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \xi} &= \sum_{j=1}^m x_j^e \frac{\partial \hat{\phi}_j^e}{\partial \xi}, & \frac{\partial y}{\partial \xi} &= \sum_{j=1}^m y_j^e \frac{\partial \hat{\phi}_j^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} &= \sum_{j=1}^m x_j^e \frac{\partial \hat{\phi}_j^e}{\partial \eta}, & \frac{\partial y}{\partial \eta} &= \sum_{j=1}^m y_j^e \frac{\partial \hat{\phi}_j^e}{\partial \eta} \end{aligned} \quad (3.23)$$

así

$$[\mathcal{J}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\phi}_1^e}{\partial \xi} & \frac{\partial \hat{\phi}_2^e}{\partial \xi} & \cdots & \frac{\partial \hat{\phi}_m^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \hat{\phi}_1^e}{\partial \eta} & \frac{\partial \hat{\phi}_2^e}{\partial \eta} & \cdots & \frac{\partial \hat{\phi}_m^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \\ \vdots & \vdots \\ x_m & y_m \end{bmatrix}. \quad (3.24)$$

Bajo la transformación (3.16) podemos escribir

$$\begin{aligned} a_{ij}^e &= \int_{\Omega^e} \nabla \phi_i^e \cdot \nabla \phi_j^e \\ &= \int_{\Omega^e} \left(\frac{\partial \phi_i^e}{\partial x} \frac{\partial \phi_j^e}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i^e}{\partial y} \frac{\partial \phi_j^e}{\partial y} \right) dx dy \\ &= \int_{\hat{\Omega}} \left[\left(\mathcal{J}_{11}^* \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \xi} + \mathcal{J}_{12}^* \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \eta} \right) \left(\mathcal{J}_{11}^* \frac{\partial \phi_j^e}{\partial \xi} + \mathcal{J}_{12}^* \frac{\partial \phi_j^e}{\partial \eta} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\mathcal{J}_{21}^* \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \xi} + \mathcal{J}_{22}^* \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \eta} \right) \left(\mathcal{J}_{21}^* \frac{\partial \phi_j^e}{\partial \xi} + \mathcal{J}_{22}^* \frac{\partial \phi_j^e}{\partial \eta} \right) \right] \mathcal{J} d\xi d\eta \\ &= \int_{\hat{\Omega}} F_{ij} d\xi d\eta \end{aligned} \quad (3.25)$$

donde \mathcal{J}_{ij}^* son las entradas de la matriz jacobiana inversa (3.21).

3.6.2. Integración Numérica

Para obtener la integral anterior (3.25),

$$\int_{\hat{\Omega}} F_{ij} d\xi d\eta$$

se emplea integración numérica (véase Burden y Faires [8]), sin embargo, el método de cuadratura gaussiana es preferible a otros métodos de integración, porque explota las propiedades de transformación al dominio unitario $\hat{\Omega}$, esto es,

$$\int_{\hat{\Omega}} F_{ij} d\xi d\eta = \sum_{I=1}^M \sum_{J=1}^N F(\xi_I, \eta_J) W_I W_J \quad (3.26)$$

donde M y N son el número de puntos de cuadratura de ξ y η respectivamente. W_I y W_J son las ponderaciones para cada punto. En Hughes [15] se dan a detalle los puntos de integración (ξ, η) para rectángulos, triángulos, tetraedros y hexaedros.

3.7. Soluciones de la Ecuación de Poisson

En la sección anterior obtuvimos las entradas $[a_{ij}]$ del sistema (3.13),

$$A\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

de igual forma se pueden obtener las entradas del vector $[\mathbf{f}_i]$. Parte fundamental del proceso del método del elemento finito recae fuertemente en poder resolver el sistema lineal anterior, lo cual no es un cálculo trivial. Sin embargo, este punto se tratará más adelante en este capítulo, por lo pronto seguiremos con ejemplos de soluciones obtenidos por FEM de la ecuación de Poisson (3.1).

3.7.1. Difusión en un Dominio Cuadrangular

Aquí Ω es un dominio cuadrangular unitario $[0, 1] \times [0, 1]$, resolver

$$-\nabla^2 u = 0 \quad \text{en } \Omega, \quad (3.27)$$

con condiciones de Dirichlet en toda la frontera. En la parte inferior se tiene

$$u(x, 0) = \sin(\pi x),$$

y cero en los demás lados del cuadrado. En la figura (3.11) se muestra el dominio dividido tanto en elementos \mathbf{Q}_1 (a) y elementos \mathbf{Q}_2 (b).

Es posible obtener una solución analítica de este problema, ver Brown y Churchill [7]. En la figura (3.12) se grafica la solución utilizando el elemento \mathbf{Q}_2 . La aproximación de \mathbf{Q}_2 es superior a la aproximación de \mathbf{Q}_1 . Esto se debe a que la solución analítica tiene terceras derivadas cuadrado integrables (ver Elman et al. [10]).

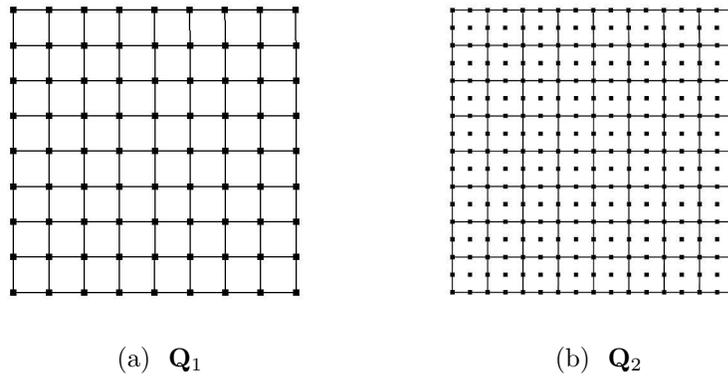


Figura 3.11: Dominio cuadrangular Ω dividido en elementos Q .

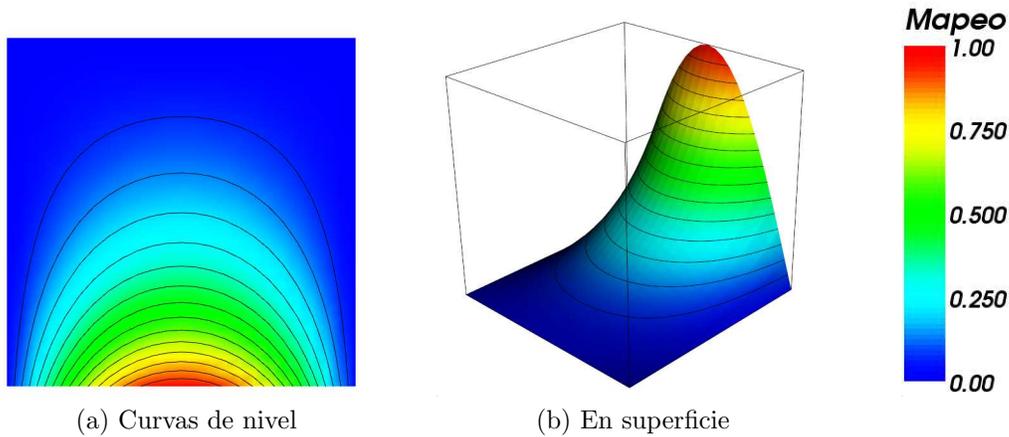


Figura 3.12: Solución Q_2 de (3.27).

3.7.2. Solución con Derivadas Discontinuas

Ω sigue siendo el dominio cuadrangular unitario (ver figura 3.11). Resolver

$$-\nabla^2 u = 10 \quad \text{en } \Omega, \tag{3.28}$$

con condición $u(x, y) = 0$ en todo $\partial\Omega$. Nótese que ahora f es una función constante. En la figura (3.13) se muestra la solución utilizando Q_2 .

Ahora se cambia el dominio Ω de forma cuadrangular a la forma de L que se muestra en la figura (3.14). Se resuelve la misma ecuación (3.28) con la mismas condiciones de frontera, esto con elemento el Q_2 . Sin embargo, es posible demostrar (véase Oden y Carey [21]), que la solución de (3.28) no tiene segundas derivadas cuadrado integrables en la vecindad de la esquina interna, esto es, $u \notin H^2(\Omega)$. Esto es fundamental, ya que la aproximación de Q_2 en esa parte no es superior a la aproximación de Q_1 , pero en las demás partes sí lo es. Para obtener más exactitud, la malla debe ser muy densa en la esquina interna.

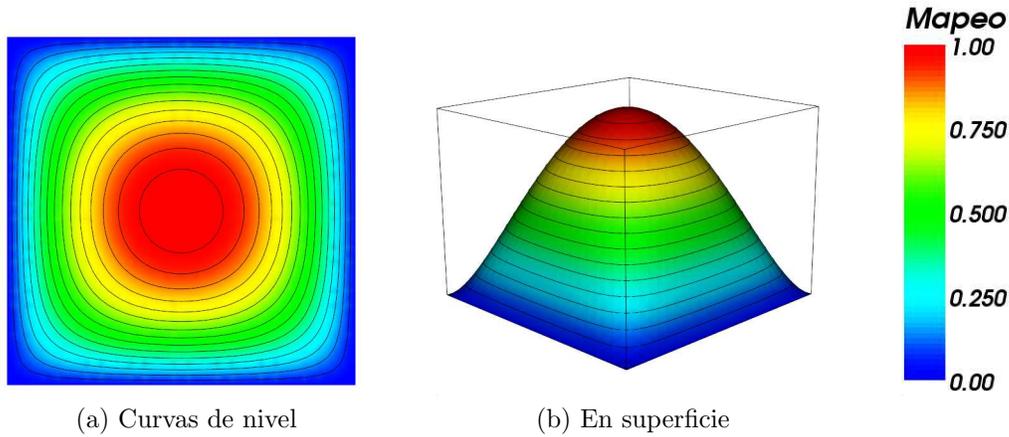


Figura 3.13: Solución Q_2 de (3.28).

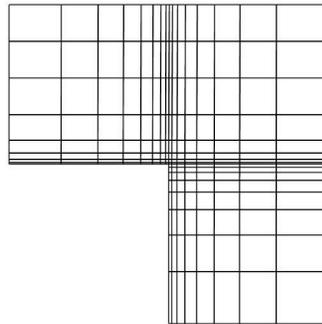


Figura 3.14: Dominio L

3.8. Ecuación de Convección-Difusión

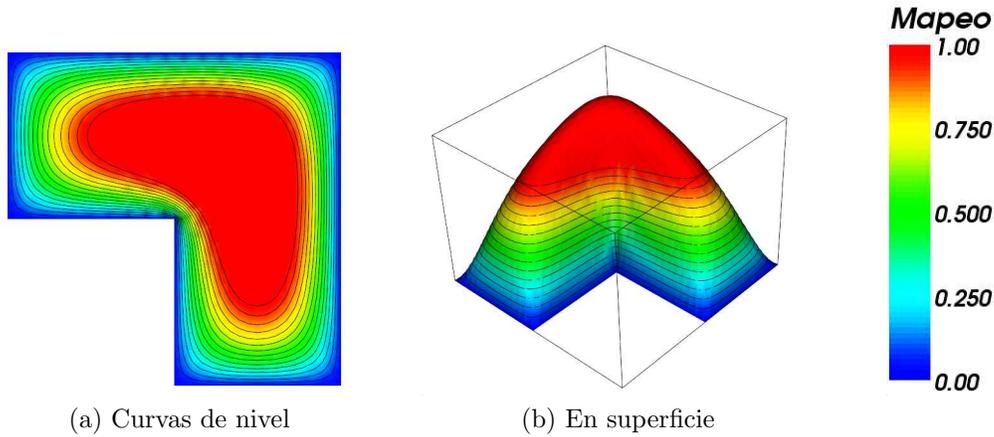
Para resolver la ecuación de convección-difusión

$$-\kappa \nabla^2 u + \vec{w} \cdot \nabla u = f \quad \text{en } \Omega, \tag{3.29}$$

donde $\kappa > 0$ y \vec{w} es la velocidad de convección. Utilizamos el método del elemento finito procediendo de la misma forma. Esto es, sea v la función de prueba, multiplicando e integrando por partes (3.29), se obtiene la forma débil

Encontrar $u \in H_E^1$ tal que

$$\kappa \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v + \int_{\Omega} (\vec{w} \cdot \nabla u) v = \int_{\Omega} v f + \int_{\partial\Omega} v g_N \quad \text{para todo } v \in H_{E_0}^1. \tag{3.30}$$


 Figura 3.15: Solución \mathbf{Q}_2 de (3.28).

Introduciendo los espacios n-dimensionales S_0^h y S_E^h obtenemos el sistema lineal

$$A\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (3.31)$$

donde

$$A = [a_{ij}], \quad a_{ij} = -\kappa \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + \int_{\Omega} (\vec{w} \cdot \nabla \phi_j) \phi_i \quad (3.32)$$

y

$$\mathbf{f} = [\mathbf{f}_i], \quad \mathbf{f}_i = \int_{\Omega} \phi_i f + \int_{\partial\Omega} \phi_i g_N - \sum_{j=n+1}^{n+n_{\partial}} \mathbf{u}_j \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j. \quad (3.33)$$

Observe que sólo el término a_{ij} cambia, que es el que incluye la integral convectiva $\int_{\Omega} (\vec{w} \cdot \nabla \phi_j) \phi_i$. Para valores pequeños de κ el término convectivo domina y es necesario que las bases de los espacios S_0^h y S_E^h sean distintas, esto se conoce como el método de Petrov-Galerkin, véase Heinrich y Pepper [12].

3.8.1. Solución en un Dominio Cuadrangular

Ω es el dominio cuadrangular unitario $[0, 1] \times [0, 1]$. Resolver

$$-\nabla^2 u + (5\mathbf{i} + \mathbf{j}) \cdot \nabla u = 0 \quad \text{en } \Omega. \quad (3.34)$$

En la parte inferior se tiene la condición de Dirichlet

$$u(x, 0) = \sin(\pi x),$$

y $u(x, y) = 0$ en los lados laterales del cuadrado. En la parte superior se tiene la condición de Neumann

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 0.$$

Observe que en (3.34) $\kappa = 1$ y $\vec{w} = 5\mathbf{i} + \mathbf{j}$. El problema se resuelve utilizando el elemento \mathbf{Q}_2 , ver figura (3.16).

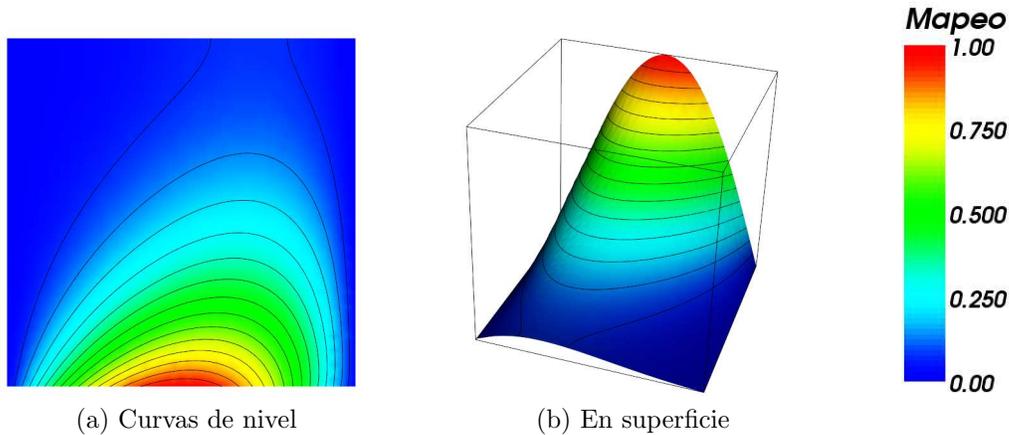


Figura 3.16: Solución \mathbf{Q}_2 de (3.34).

3.9. Solución de Sistemas Lineales

Es fundamental poder resolver el sistema lineal

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (3.35)$$

en el método del elemento finito. Sin embargo, este problema no es trivial, ya que es común tener sistemas muy grandes a resolver, por ejemplo en el problema (3.7.1) la dimensión del vector \mathbf{u} es 725, y en problemas en \mathbf{R}^3 es común tener sistemas de dimensión de millones. Otra característica particular del sistema es que la matriz \mathbf{A} es *esparcida*, esto es, una gran mayoría de sus entradas son cero y no tiene una estructura regular, nunca es totalmente diagonal, tridiagonal, tridiagonal por bloques, etc. La figura (3.17) muestra la estructura de una matriz esparcida en particular. La propiedad de esparcimiento debilita enormemente los métodos tradicionales como el de Gauss-Jordan, LU, entre otros, debido a que requieren mucha memoria para realizar los cálculos numéricos.

Para resolver el sistema (3.35) se emplean métodos iterativos de minimización que explotan las propiedades de la matriz \mathbf{A} . Por ejemplo, para la ecuación de Poisson es posible demostrar⁴ que la matriz \mathbf{A} siempre es definida positiva para toda malla que discretize a Ω . Una matriz \mathbf{A} es definida positiva si es simétrica y

$$\mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{u} > 0 \quad \text{para todo } \mathbf{u} \neq 0.$$

La utilidad de que una matriz sea definida positiva es que tiene solución única, y más importante sea

$$l(\mathbf{v}) : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R},$$

⁴Ver Elman *et al.* [10]

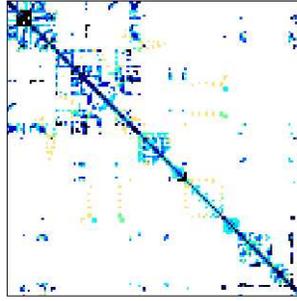


Figura 3.17: Estructura de una matriz esparcida.

es decir, $l(\mathbf{v})$ es una función que va desde el espacio vectorial \mathbf{R}^n a los reales, donde n es la dimensión de nuestro sistema y además sea

$$l(\mathbf{v}) = (A\mathbf{v}, \mathbf{v}) - (\mathbf{v}, \mathbf{f}),$$

donde (\cdot, \cdot) es el producto escalar euclidiano, esto es $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T \mathbf{y}$. Así $l(\mathbf{v})$ es una función cuadrática y tiene sólo un punto mínimo absoluto \mathbf{u} , este punto \mathbf{u} satisface $A\mathbf{u} = \mathbf{f}$, véase Saad [29].

Para la ecuación de convección-difusión la matriz \mathbf{A} no es simétrica, pero es definida positiva, esto es, que todos sus eigenvalores son positivos, sin embargo, aún es posible definir una función $l(\mathbf{v})$ que tenga las propiedades anteriores. Buenas referencias para resolver sistemas lineales de este tipo son Saad [29] y Elman *et al.* [10].

Capítulo 4

Método del Elemento Finito para la Dinámica de Fluidos

4.1. Ecuaciones de Stokes

Como un caso especial de las ecuaciones de Navier-Stokes (2.11), las ecuaciones de Stokes modelan un fluido altamente viscoso ($Re \rightarrow 0$), donde las fuerzas viscosas predominan fuertemente sobre las fuerzas inerciales, generando así un flujo lento. Las ecuaciones de Stokes son:

$$-\nabla^2 \vec{u} + \nabla p = \vec{f} \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (4.2)$$

donde $\vec{u} = u_x \mathbf{i} + u_y \mathbf{j}$ y $\vec{f} = f_x \mathbf{i} + f_y \mathbf{j}$, sin embargo, estas ecuaciones están en notación compacta o vectorial. En forma completa las ecuaciones de Stokes en \mathbf{R}^2 son

$$-\nabla^2 u_x + \frac{\partial p}{\partial x} = f_x \quad (4.3)$$

$$-\nabla^2 u_y + \frac{\partial p}{\partial y} = f_y \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0. \quad (4.5)$$

Observemos que las dos primeras ecuaciones son iguales a la ecuación de Poisson a excepción del término $\frac{\partial p}{\partial x}$ y $\frac{\partial p}{\partial y}$, respectivamente. Las condiciones de frontera Dirichlet y Neumann para las ecuaciones de Stokes son de la forma¹,

$$\vec{u} = \vec{w} \quad \text{en } \partial\Omega_D \quad \frac{\partial \vec{u}}{\partial n} - \vec{n}p = \vec{s} \quad \text{en } \partial\Omega_N \quad (4.6)$$

o en forma completa

¹Véase Gresho y Sani [18].

$$\begin{aligned}
 u_x = w_x \quad \text{y} \quad u_y = w_y & \quad \text{en } \partial\Omega_D \\
 n_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + n_y \frac{\partial u_x}{\partial y} - n_x p = s_x \quad \text{y} \quad n_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + n_y \frac{\partial u_y}{\partial y} - n_y p = s_y & \quad \text{en } \partial\Omega_N
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

4.1.1. Formulación Débil

Para obtener la formulación débil, multiplicamos e integramos (4.1) por la función vectorial de prueba $\vec{v} = (v_x, v_y)$ y la ecuación (4.2) por la función de prueba q ,

$$\int_{\Omega} \vec{v} \cdot (-\nabla^2 \vec{u} + \nabla p) = \int_{\Omega} \vec{v} \cdot \vec{f} \tag{4.8}$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} = 0. \tag{4.9}$$

Ahora integramos por partes el lado izquierdo de (4.8) (véase Elman *et al.* [10])

$$- \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla^2 \vec{u} + \nabla p) = \int_{\Omega} \nabla \vec{u} : \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} - \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial n} - \vec{n} p \right) \cdot \vec{v},$$

donde $\nabla \vec{u} : \nabla \vec{v}$ es el producto escalar por componente, esto es,

$$\nabla \vec{u} : \nabla \vec{v} = \nabla u_x \cdot \nabla v_x + \nabla u_y \cdot \nabla v_y.$$

Considerando esta ecuación y las condiciones de frontera (4.6) introducimos los espacios velocidad de solución y de prueba,

$$\mathbf{H}_E^1 = \{ \vec{u} \in H^1(\Omega)^d \mid \vec{u} = \vec{w} \text{ en } \partial\Omega_D \}, \tag{4.10}$$

$$\mathbf{H}_{E_0}^1 = \{ \vec{v} \in H^1(\Omega)^d \mid \vec{v} = \vec{0} \text{ en } \partial\Omega_D \}, \tag{4.11}$$

donde $d = 2$ o $d = 3$ es la dimensión espacial. Observe que para la función de prueba q en (4.9) no se requieren derivadas, pero que sí sea cuadrado integrable, esto es, $q \in L_2(\Omega)$. Con esto obtenemos la formulación débil:

Encontrar $\vec{u} \in \mathbf{H}_E^1$ y $p \in L_2(\Omega)$ tal que

$$\int_{\Omega} \nabla \vec{u} : \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} + \int_{\partial\Omega_N} \vec{s} \cdot \vec{v} \quad \text{para todo } \vec{v} \in \mathbf{H}_{E_0}^1, \tag{4.12}$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad \text{para todo } q \in L_2(\Omega). \tag{4.13}$$

4.1.2. Aproximación Mixta de Elementos Finitos

Como en el capítulo anterior, se discretiza la formulación débil introduciendo los espacios n -dimensionales $\mathbf{X}_E^h \subset \mathbf{H}_E^1$ y $M_h \subset L_2(\Omega)$. Entonces tenemos la formulación como: Encontrar $\vec{u}_h \in \mathbf{X}_E^h$ y $p_h \in M_h$ tales que

$$\int_{\Omega} \nabla \vec{u}_h : \nabla \vec{v}_h - \int_{\Omega} p_h \nabla \cdot \vec{v}_h = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v}_h + \int_{\partial\Omega_N} \vec{s} \cdot \vec{v}_h \quad \text{para todo } \vec{v}_h \in \mathbf{X}_0^h, \quad (4.14)$$

$$\int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \vec{u}_h = 0 \quad \text{para todo } q_h \in M_h \quad (4.15)$$

Para obtener un sistema matricial introducimos una base de funciones de velocidad $\{\vec{\phi}_j\}$ para \mathbf{X}_0^h , tales que,

$$\vec{u}_h = \sum_{j=1}^{n_u} \mathbf{u}_j \vec{\phi}_j + \sum_{j=n_u+1}^{n_u+n_{\partial}} \mathbf{u}_j \vec{\phi}_j. \quad (4.16)$$

Los coeficientes $\mathbf{u}_j : j = n_u + 1, \dots, n_u + n_{\partial}$ son tales que modelan las condiciones de Dirichlet en la frontera. Para aproximar la presión p , introducimos la funciones escalares base $\{\psi_k\}$, tales que,

$$p_h = \sum_{k=1}^{n_p} \mathbf{p}_k \psi_k, \quad (4.17)$$

por lo tanto la formulación discreta (4.14)-(4.15) puede ser expresada mediante el sistema lineal

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & B^T \\ B & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}. \quad (4.18)$$

La matriz \mathbf{A} es conocida como *matriz de vector difusión* y B como *matriz de divergencia*. Las entradas están dadas por

$$\mathbf{A} = [a_{ij}], \quad a_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \vec{\phi}_i : \nabla \vec{\phi}_j \quad (4.19)$$

$$B = [b_{kj}], \quad b_{kj} = - \int_{\Omega} \psi_k \nabla \cdot \vec{\phi}_j, \quad (4.20)$$

para i y $j = 1, \dots, n_u$ y $k = 1, \dots, n_p$. Las entradas del lado derecho son de la forma

$$\mathbf{f} = [\mathbf{f}_i], \quad \mathbf{f}_i = \int_{\Omega} \vec{\phi}_i \cdot \vec{f} + \int_{\partial\Omega} \vec{\phi}_i \cdot \vec{s} - \sum_{j=n_u+1}^{n_u+n_{\partial}} \mathbf{u}_j \int_{\Omega} \nabla \vec{\phi}_i : \nabla \vec{\phi}_j. \quad (4.21)$$

$$\mathbf{g} = [\mathbf{g}_k], \quad \mathbf{g}_k = - \sum_{j=n_u+1}^{n_u+n_{\partial}} \mathbf{u}_j \int_{\Omega} \psi_k \nabla \cdot \vec{\phi}_j. \quad (4.22)$$

El par de funciones (\vec{u}, p_h) obtenidas al sustituir por $\mathbf{u} \in \mathbf{R}^{n_u}$ y $\mathbf{p} \in \mathbf{R}^{n_p}$ en (4.28) y (4.29) se le conoce como la solución *mixta* de elementos finitos. El sistema (4.18) es conocido como el *problema discreto de Stokes*.

En la práctica y en dos dimensiones, aproximamos la velocidad con una base escalar de elementos finitos, esto es, sean las funciones base $\{\phi\}_{j=1}^n$ y fijamos $n_u = 2n$, entonces las funciones base para la velocidad son de la forma

$$\{\vec{\phi}_1, \dots, \vec{\phi}_{2n}\} = \{(\phi_1, 0)^T, \dots, (\phi_n, 0)^T, (0, \phi_1)^T, \dots, (0, \phi_n)^T\} \quad (4.23)$$

Esta descomposición por coordenadas induce a descomponer el sistema (4.18) en bloques. En particular, sea $\mathbf{u} = ([\mathbf{u}_x]_1, \dots, [\mathbf{u}_x]_n, [\mathbf{u}_y]_1, \dots, [\mathbf{u}_y]_n)^T$, (4.18) queda

$$\begin{bmatrix} A & O & B_x^T \\ O & A & B_y^T \\ B_x & B_y & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_x \\ \mathbf{u}_y \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_x \\ \mathbf{f}_y \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}, \quad (4.24)$$

donde A es la matriz de difusión $n \times n$ obtenida de la misma forma que en la ecuación de Poisson en el capítulo anterior. Las matrices B_x y B_y son de dimensión $n_p \times n$ y representan las derivadas *débiles*² en las direcciones x y y :

$$A = [a_{ij}], \quad a_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \quad (4.25)$$

$$B_x = [b_{x,kj}], \quad b_{x,kj} = - \int_{\Omega} \psi_k \frac{\partial \phi_j}{\partial x}, \quad (4.26)$$

$$B_y = [b_{y,kj}], \quad b_{y,kj} = - \int_{\Omega} \psi_k \frac{\partial \phi_j}{\partial y}. \quad (4.27)$$

4.1.3. Elementos Finitos Estables

En la sección anterior se introdujeron las aproximaciones de elementos finitos para \vec{u}_h y p_h , esto es,

$$\vec{u}_h = \sum_{j=1}^{n_u} \mathbf{u}_j \vec{\phi}_j + \sum_{j=n_u+1}^{n_u+n_p} \mathbf{u}_j \vec{\phi}_j, \quad (4.28)$$

y

$$p_h = \sum_{k=1}^{n_p} \mathbf{p}_k \psi_k. \quad (4.29)$$

De acuerdo a la ecuación (4.23), las bases de velocidad $\{\vec{\phi}_j\}$ se descomponen en componentes con las bases escalares $\{\phi\}_{j=1}^n$. Sin embargo, no se debe utilizar el mismo elemento tanto para ϕ_j como para ψ_k , por ejemplo, si la presión es aproximada con el elemento \mathbf{Q}_1 , se debe utilizar

²Para la definición de derivada débil véase Oden y Reddy [23].

el elemento \mathbf{Q}_2 para aproximar cada componente de velocidad. Para justificar esto, se considera el problema de flujo de arrastre en una cavidad, esto es, las ecuaciones de Stokes en un dominio unitario cuadrangular Ω ,

$$-\nabla^2 \vec{u} + \nabla p = \vec{0} \quad (4.30)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (4.31)$$

con las condiciones de frontera $\vec{u}(x, 1) = \mathbf{i}$ en la parte superior y $\vec{u}(x, y) = \vec{0}$ en todo los demás lados (ver figura 4.1).

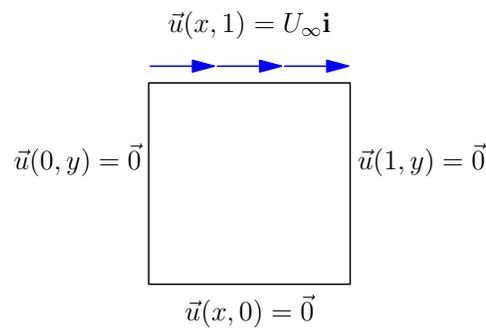


Figura 4.1: Problema de la cavidad rectangular. Condiciones de Frontera.

Es posible demostrar³ que las ecuaciones de Stokes, con condiciones de Dirichlet en toda frontera $\partial\Omega$, siempre tienen solución, pero *no es única*, específicamente; siempre existe una solución (\vec{u}^*, p^*) de (4.30) y (4.31), pero la presión difiere por una constante, esto quiere decir que $(\vec{u}^*, p^* + c)$ también es una solución del problema. Entonces, de manera similar se tiene que garantizar que la solución del problema discreto

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & B^T \\ B & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}, \quad (4.32)$$

que resulta de emplear el método del elemento finito, tiene solución $(\mathbf{u}^*, \mathbf{p}^*)$, y además $(\mathbf{u}^*, \mathbf{p}^* + c(1, 1, 1)^T)$ también sea solución. Para garantizar esto, los elementos finitos $(\vec{\phi}_j, \psi_k)$ con los que aproximamos (u, p) deben satisfacer la condición de *Babuska-Brezzi*⁴. Las parejas de elementos $\mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_1$ y $\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1$ cumplen esta condición (figuras 4.2-4.3).

La figura (4.4) muestra la solución del problema de flujo en la cavidad utilizando $\mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_1$. Si utilizamos el par $\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_1$ y resolvemos el sistema lineal (4.32), la velocidad decrece un poco en magnitud (ver figura 4.5). A simple vista parece que no hay mucha diferencia entre los campos

³Bajo ciertas condiciones en Ω . Ver Oden y Carey [23].

⁴Esta condición exige que cada componente de velocidad debe ser aproximada con más vértices con respecto a la presión, entre otras propiedades. Véase [10] y [23].

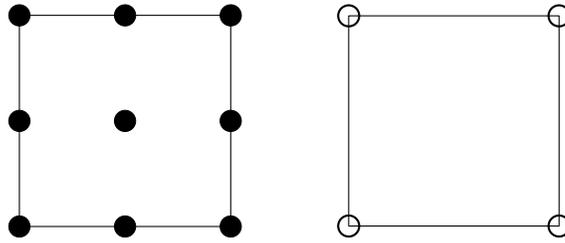


Figura 4.2: Par estable $Q_2 - Q_1$ (• componentetes de velocidad; o presión).

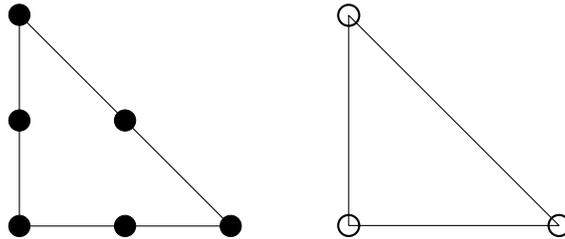


Figura 4.3: Par estable $P_2 - P_1$ (• componentetes de velocidad; o presión).

vectoriales, sin embargo, en la figura (4.6) se grafica la presión, tanto la solución obtenida por medio de $Q_2 - Q_1$ como por $Q_1 - Q_1$. Observe que la presión obtenida de $Q_1 - Q_1$ es oscilante y sólo toma valores de -1 y 1 únicamente. A este patrón de oscilación se le conoce como *patrón de ajedrez*. Para una explicación más profunda sobre la inestabilidad del par $Q_1 - Q_1$ véase Gresho y Sani [18].

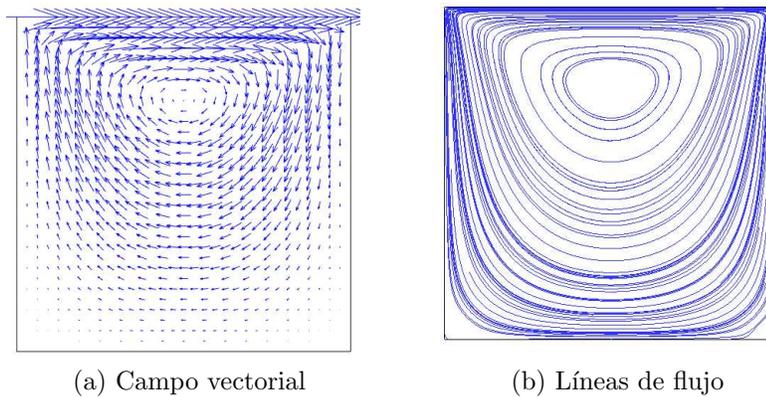


Figura 4.4: Solución $Q_2 - Q_1$ del problema de cavidad.

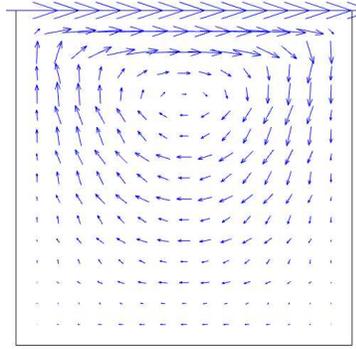


Figura 4.5: Solución $\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_1$ del problema de cavidad. Campo vectorial.

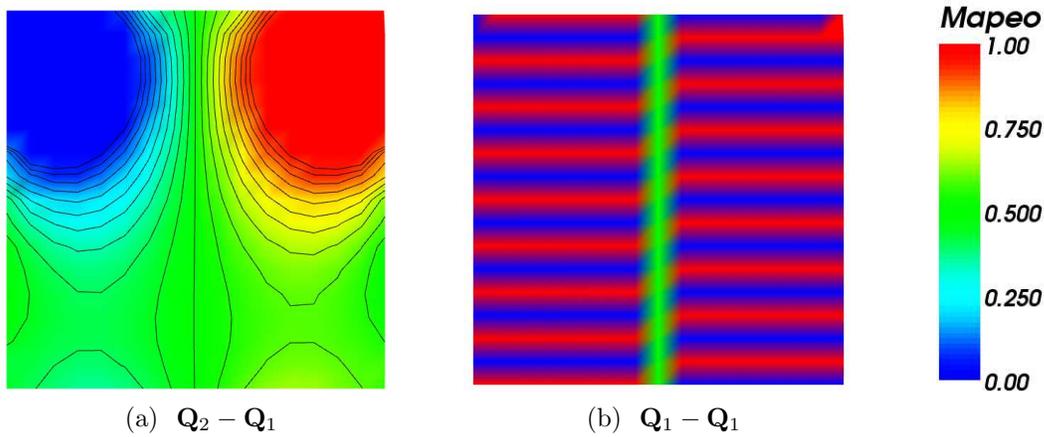


Figura 4.6: Presión obtenida del problema de cavidad.

4.1.4. Solución en un Dominio Semicircular

Consideremos un flujo viscoso que entra a una velocidad $U_\infty = 1$ en el dominio semicircular mostrado en la figura (4.7). Específicamente $-3 \leq x \leq 3, 0 \leq y \leq 2$ y en el centro se encuentra un círculo de radio unitario. El flujo es libre del lado derecho, esto es, se tiene la condición de Neumann

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} - p = 0 \quad \text{en } x = 3,$$

y como el flujo es viscoso, la velocidad es cero en todo lado inferior incluyendo la superficie semicircular

$$\vec{u}(x, 0) = 0.$$

La solución se muestra en la figura (4.8) y como es de esperarse, sobre una superficie (u obstáculo) “suave”, el flujo de Stokes es uniforme (ver White [33]). En contraste, si consideramos un obstáculo rectangular, el flujo de Stokes no es uniforme (ver figura 4.9).

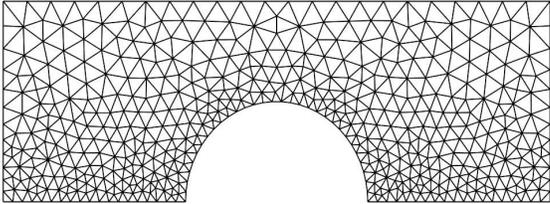


Figura 4.7: Dominio semicircular Ω .

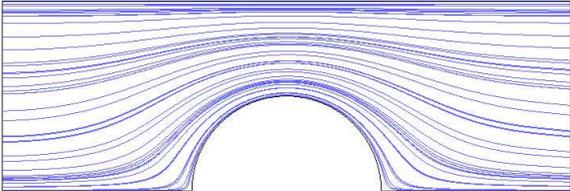


Figura 4.8: Solución $\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1$ del flujo sobre un obstáculo circular. Líneas de Flujo.

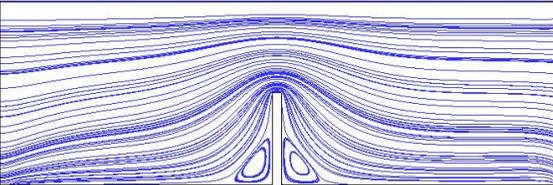


Figura 4.9: Solución $\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1$ del flujo sobre un obstáculo rectangular. Líneas de Flujo.

4.2. Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes en notación compacta son

$$\begin{aligned} -\nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} + \nabla p &= \vec{f} \\ \nabla \cdot \vec{u} &= 0. \end{aligned} \quad (4.33)$$

En notación completa y en \mathbf{R}^2 son de la forma

$$-\nu \nabla^2 u_x + \vec{u} \cdot \nabla u_x + \frac{\partial p}{\partial x} = f_x \quad (4.34)$$

$$-\nu \nabla^2 u_y + \vec{u} \cdot \nabla u_y + \frac{\partial p}{\partial y} = f_y \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0. \quad (4.36)$$

Los términos $\vec{u} \cdot \nabla u_x$ y $\vec{u} \cdot \nabla u_y$ son no lineales, y esto es la causa de la dificultad de las ecuaciones de Navier-Stokes. Las condiciones de frontera son iguales a las de las ecuaciones de Stokes,

$$\vec{u} = \vec{w} \quad \text{en } \partial\Omega_D \quad \frac{\partial \vec{u}}{\partial n} - \vec{n}p = \vec{s} \quad \text{en } \partial\Omega_N. \quad (4.37)$$

4.2.1. Formulación Débil

La formulación débil se determina de la misma forma como se obtuvo al problema de Stokes. Introduciendo los espacios de solución y de prueba respectivamente,

$$\mathbf{H}_E^1 = \{ \vec{u} \in H^1(\Omega)^d \mid \vec{u} = \vec{w} \quad \text{en } \partial\Omega_D \}, \quad (4.38)$$

$$\mathbf{H}_{E_0}^1 = \{ \vec{v} \in H^1(\Omega)^d \mid \vec{v} = \vec{0} \quad \text{en } \partial\Omega_D \}, \quad (4.39)$$

la formulación débil queda:

Encontrar $\vec{u} \in \mathbf{H}_E^1$ y $p \in L_2(\Omega)$ tal que

$$\nu \int_{\Omega} \nabla \vec{u} : \nabla \vec{v} + \int_{\Omega} (\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}) \cdot \vec{v} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} + \int_{\partial\Omega_N} \vec{s} \cdot \vec{v} \quad \text{para } \vec{v} \in \mathbf{H}_{E_0}^1 \quad (4.40)$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad \text{para todo } q \in L_2(\Omega). \quad (4.41)$$

4.2.2. Linealización

Hasta ahora, todas las ecuaciones parciales que se han resuelto son lineales, esto es, si u y v son soluciones, entonces $au + bv$, donde $a, b \in \mathbf{R}$ también es solución. Por lo tanto, al aplicar método del elemento finito se obtiene un sistema de ecuaciones lineales a resolver. Las ecuaciones de Navier-Stokes son no lineales, si se aplicará FEM se obtendría un sistema matricial no lineal a resolver, y la única forma de obtener una solución es aproximando iterativamente este sistema matricial con un sistema de ecuaciones lineales. Sin embargo, también es posible aproximar iterativamente la formulación débil no lineal (4.40) con una aproximación débil lineal. Para esto, empecemos definiendo los residuos $R_k(\vec{v})$, $r_k(q)$ de la siguiente forma

$$\begin{aligned} R_k &= \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} + \int_{\partial\Omega_N} \vec{s} \cdot \vec{v} - c(\vec{u}_k; \vec{u}_k, \vec{v}) - \nu \int_{\Omega} \nabla \vec{u}_k : \nabla \vec{v} + \int_{\Omega} p_k \nabla \cdot \vec{v}, \\ r_k &= - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u}_k \end{aligned}$$

donde $c(\cdot)$ es la forma trilineal que representa el término convectivo no lineal, esto es

$$c(\vec{z}; \vec{u}, \vec{v}) = \int_{\Omega} (\vec{z} \cdot \nabla \vec{u}) \cdot \vec{v}. \quad (4.42)$$

Ahora si $\vec{u} = \vec{u}_k + \delta\vec{u}_k$ y $p = p_k + \delta p_k$, en donde $\delta\vec{u}_k \in \mathbf{H}_{E_0}^1$ y $\delta p_k \in L_2(\Omega)$. La forma débil (4.40)-(4.41) queda de la siguiente forma

$$D(\vec{u}_k, \delta\vec{u}_k, \vec{v}) + \nu \int_{\Omega} \nabla \delta\vec{u}_k : \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} \delta p_k (\nabla \cdot \vec{v}) = R_k(\vec{v}) \quad (4.43)$$

$$\int_{\Omega} q (\nabla \cdot \delta\vec{u}_k) = r_k(q) \quad (4.44)$$

para todo $\vec{v} \in \mathbf{H}_{E_0}^1$ y $q \in L_2(\Omega)$, donde $D(\vec{u}_k, \delta\vec{u}_k, \vec{v})$ es la diferencia de términos no lineales,

$$D(\vec{u}_k, \delta\vec{u}_k, \vec{v}) = \int_{\Omega} (\delta\vec{u}_k + \vec{u}_k) \cdot \nabla (\delta\vec{u}_k + \vec{u}_k) \cdot \vec{v} - \int_{\Omega} (\vec{u}_k \cdot \nabla \vec{u}_k) \cdot \vec{v} \quad (4.45)$$

$$= c(\delta\vec{u}_k; \delta\vec{u}_k, \vec{v}) + c(\delta\vec{u}_k; \vec{u}_k, \vec{v}) + c(\vec{u}_k; \delta\vec{u}_k, \vec{v}). \quad (4.46)$$

Linealizamos las ecuaciones (4.43)-(4.44) eliminando el término cuadrático $c(\delta\vec{u}_k; \delta\vec{u}_k, \vec{v})$, entonces se tiene,

$$c(\delta\vec{u}_k; \vec{u}_k, \vec{v}) + c(\vec{u}_k; \delta\vec{u}_k, \vec{v}) + \nu \int_{\Omega} \nabla \delta\vec{u}_k : \nabla \vec{v} - \int_{\Omega} \delta p_k (\nabla \cdot \vec{v}) = R_k(\vec{v}) \quad (4.47)$$

$$\int_{\Omega} q (\nabla \cdot \delta\vec{u}_k) = r_k(q). \quad (4.48)$$

A este método se le conoce como el *método de Newton*. Con la iteración anterior, se obtiene la nueva iteración con $\vec{u}_{k+1} = \vec{u}_k + \delta\vec{u}_k$, $p_{k+1} = p_k + \delta p_k$ y se procede a resolver (4.47)-(4.48).

Si también eliminamos el término $c(\delta\vec{u}_k; \vec{u}_k, \vec{v})$ se le conoce como el *método de Picard*. El orden de convergencia del método de Newton es cuadrático, pero su radio es reducido, esto es, la aproximación inicial debe estar muy cerca de la solución, en cambio; el método de Picard tiene orden lineal, pero su radio de convergencia es muy amplio (ver Elman *et al.* [10]). Es importante mencionar que otro de los métodos de linealización ampliamente usado es el método de *Uzawa* (ver Fortin y Glowinski [11]).

4.2.3. Aproximación Mixta de Elementos Finitos

Similarmente como en las ecuaciones de Stokes, discreticemos la formulación débil (4.40)-(4.41) introduciendo los espacios n -dimensionales $\mathbf{X}_E^h \subset \mathbf{H}_E^1$ y $M_h \subset L_2(\Omega)$. Entonces tenemos la formulación débil como, encontrar $\vec{u}_h \in \mathbf{X}_E^h$ y $p_h \in M_h$ tales que

$$\begin{aligned} \nu \int_{\Omega} \nabla \vec{u}_h : \nabla \vec{v}_h + \int_{\Omega} (\vec{u}_h \cdot \nabla \vec{u}_h) \cdot \vec{v}_h - \int_{\Omega} p_h \nabla \cdot \vec{v}_h \\ = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v}_h + \int_{\partial\Omega_N} \vec{s} \cdot \vec{v}_h \quad \text{para todo } \vec{v}_h \in \mathbf{X}_0^h, \\ \int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \vec{u}_h = 0 \quad \text{para todo } q_h \in M^h. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Linealizando este sistema con el método de Newton, obtenemos las correcciones en cada iteración $\delta\vec{u}_h \in \mathbf{X}_0^h$ y $\delta p_h \in M^h$ resolviendo

$$c(\delta\vec{u}_h; \vec{u}_h, \vec{v}_h) + c(\vec{u}_h; \delta\vec{u}_h, \vec{v}_h) + \nu \int_{\Omega} \nabla \delta\vec{u}_h : \nabla \vec{v}_h - \int_{\Omega} \delta p_h (\nabla \cdot \vec{v}) = R_k(\vec{v}_h) \quad (4.50)$$

$$\int_{\Omega} q_h (\nabla \cdot \delta\vec{u}_h) = r_k(q_h) \quad (4.51)$$

para todo $\vec{v}_h \in \mathbf{X}_0^h$ y $q_h \in M^h$. Para obtener un sistema matricial introducimos las bases de funciones de velocidad $\{\vec{\phi}_j\}$ para \mathbf{X}_0^h , tales que,

$$\vec{u}_h = \sum_{j=1}^{n_u} \mathbf{u}_j \vec{\phi}_j + \sum_{j=n_u+1}^{n_u+n_{\partial}} \mathbf{u}_j \vec{\phi}_j, \quad \delta\vec{u}_h = \sum_{j=1}^{n_u} \Delta\mathbf{u}_j \vec{\phi}_j. \quad (4.52)$$

Los coeficientes $\mathbf{u}_j : j = n_u + 1, \dots, n_u + n_{\partial}$ son tales que modelan las condiciones de Dirichlet en la frontera. Para aproximar la presión p , introducimos la funciones escalares base $\{\psi_k\}$, tales que,

$$p_h = \sum_{k=1}^{n_p} \mathbf{p}_k \psi_k, \quad \delta p_h = \sum_{k=1}^{n_p} \Delta\mathbf{p}_k \psi_k. \quad (4.53)$$

Sustituyendo en (4.50)-(4.51) queda el sistema matricial

$$\begin{bmatrix} \nu \mathbf{A} + \mathbf{N} + \mathbf{W} & B^T \\ B & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\mathbf{u} \\ \Delta\mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}. \quad (4.54)$$

Las nuevas matrices son \mathbf{N} y \mathbf{W} , ambas son de dimensión $n_u \times n_u$. La matriz \mathbf{N} representa el término convectivo y la matriz \mathbf{W} , representa la derivada que se obtiene del método de Newton. Ambas matrices dependen del valor actual estimado \vec{u}_h ,

$$\mathbf{N} = [\mathbf{n}_{ij}], \quad \mathbf{n}_{ij} = \int_{\Omega} (\vec{u}_h \cdot \nabla \vec{\phi}) \cdot \vec{\phi}_i, \quad (4.55)$$

$$\mathbf{W} = [\mathbf{w}_{ij}], \quad \mathbf{w}_{ij} = \int_{\Omega} (\vec{\phi}_j \cdot \nabla \vec{u}_h) \cdot \vec{\phi}_i \quad (4.56)$$

para i y $j = 1, \dots, n_u$. Las entradas del lado derecho son los residuos no lineales (4.50)-(4.51),

$$\mathbf{f} = [\mathbf{f}_i],$$

$$\mathbf{f}_i = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{\phi}_i + \int_{\partial\Omega} \vec{s} \cdot \vec{\phi}_i - \int_{\Omega} \vec{u}_h \cdot \nabla \vec{u}_h \cdot \vec{\phi}_i - \nu \int_{\Omega} \nabla \vec{u}_h : \nabla \vec{\phi}_i + \int_{\Omega} p_h (\nabla \cdot \vec{\phi}_i), \quad (4.57)$$

$$\mathbf{g} = [\mathbf{g}_k], \quad \mathbf{g}_k = - \int_{\Omega} \psi_k (\nabla \cdot \vec{u}_h). \quad (4.58)$$

Si aproximamos a las componentes de velocidad con bases escalares, como en (4.23) el sistema (4.54) queda de la forma

$$\begin{bmatrix} \nu A + N + W_{xx} & W_{xy} & B_x^T \\ W_{yx} & W_{yy} & B_y^T \\ B_x & B_y & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_x \\ \Delta \mathbf{u}_y \\ \Delta p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_x \\ \mathbf{f}_y \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}, \quad (4.59)$$

donde N es de dimensión $n \times n$ y sus entradas son

$$N = [n_{ij}], \quad n_{ij} = \int_{\Omega} (\vec{u}_h \cdot \nabla \phi_j) \phi_i. \quad (4.60)$$

Las matrices W_{xx} , W_{yy} , W_{xy} y W_{yx} tienen dimensión $n \times n$. Por ejemplo, las entradas de W_{xy} son de la forma,

$$W_{xy} = [w_{xy,ij}], \quad w_{xy,ij} = \int_{\Omega} \frac{\partial u_x}{\partial y} \phi_i \phi_j. \quad (4.61)$$

4.2.4. Solución en una Cavidad

Continuemos con el problema de la cavidad (4.1.3), se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes para distintos valores de ν , esto es, $\nu = 0.1, 0.01, 0.001$ y 0.0001 . En las figuras (4.10) y (4.11) se muestran estas soluciones. Se observa cómo las líneas de flujo se vuelven circulares, y la aparición de pequeños vórtices en las paredes a medida que se incrementa el número de Reynolds, ver Ghia[16].

4.2.5. Solución en un Dominio Semicircular

Como último ejemplo consideremos el dominio semicircular y las condiciones de frontera que se dieron en la sección (4.1.4). Se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes para $\nu = 0.1$, ver figura (4.12).

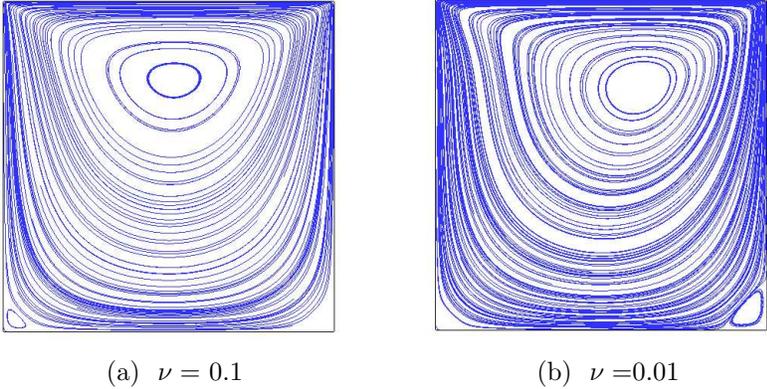


Figura 4.10: Solución $Q_2 - Q_1$ del problema de cavidad.

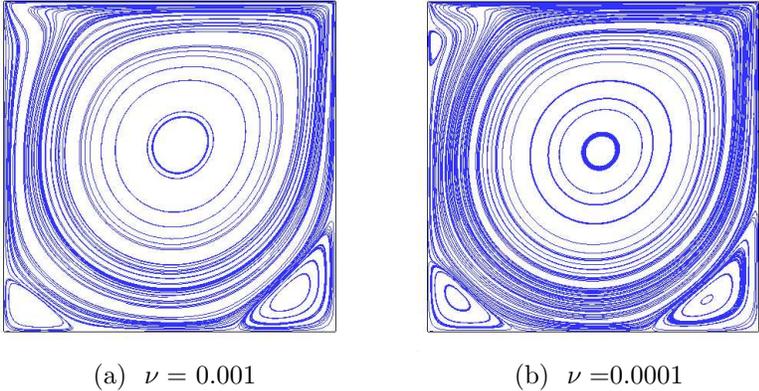


Figura 4.11: Solución $Q_2 - Q_1$ del problema de cavidad.

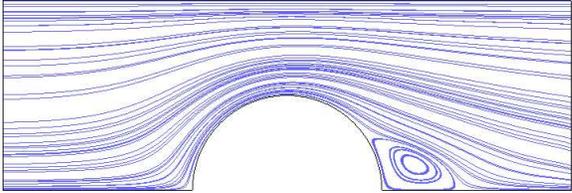


Figura 4.12: Solución en un dominio semicircular, $\nu = 0.1$. Líneas de Flujo.

Capítulo 5

Mezclado en Tanques Agitados y el Método del Elemento Finito

En este último capítulo, se aplicará el método del elemento finito para simular un experimento de mezclado en tanques agitados. El montaje experimental consta de un tanque de diámetro $D = 165 \text{ mm}$, que contiene un fluido newtoniano con viscosidad $\mu = 1.41 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ y densidad $\rho = 1250 \text{ kg/m}^3$. Dentro del fluido y en el centro del tanque, se coloca un impulsor que gira sobre su propio eje, en el sentido de las manecillas del reloj a una velocidad constante $\omega = 0.5 \text{ rps}$. En la figura (5.1) se muestra un diagrama básico del experimento.

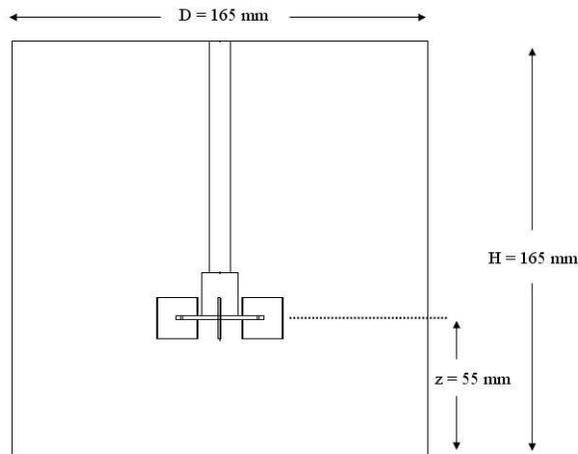


Figura 5.1: Configuración básica del experimento.

Existen diferentes tipos de impulsores; aquí se utilizará una turbina Rushton¹, la cual consiste en seis hélices posicionadas uniformemente alrededor de un cilindro, ver figura (5.2). Para la configuración de este experimento se tiene un número de Reynolds (2.20) igual a 1.34.

¹Ver Tatterson [31].

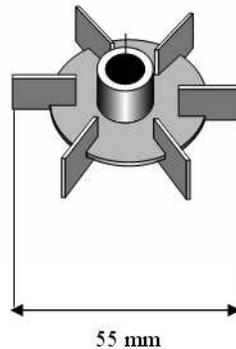


Figura 5.2: Turbina Rushton.

Antes de modelar matemáticamente este experimento y resolverlo, es necesario considerar qué es lo que se debe esperar a “grandes rasgos” del comportamiento del fluido.

5.1. Técnicas Experimentales de Visualización

Las técnicas de visualización por colorimetría, son técnicas experimentales que se emplean para obtener información cualitativa del comportamiento del flujo y nivel de homogeneidad del mezclado. Una técnica consiste² en llenar el tanque con ácido (color amarillo) en la parte superior, y glicerina (color azul) en la parte inferior, ver figura (5.3). Se corre el experimento y se obtiene la figura (5.4). Se observa que cerca del impulsor se generan dos zonas mezcladas, pero con un color distinto. Estas zonas tienen forma geométrica parecida a la de un toro (uno superior y uno inferior) y están separadas una de la otra. Por otra parte, lejos del impulsor persiste un color amarillo (ya que la cantidad de ácido es mayor), éstas zonas están muertas o segregadas. Este comportamiento prevalece para tiempos infinitos, es decir, las zonas segregadas y mezcladas nunca interactúan y por lo tanto nunca se logra la uniformidad global.

5.2. Modelo Matemático

La simulación es empleada al estudio del mezclado en tanques agitados, para obtener información más a detalle de las estructuras formadas en este experimento. Para ello se procede a modelar el fenómeno. Como se dijo en la sección anterior, experimentalmente se ha observado que las zonas segregadas prevalecen para tiempos infinitos, y más aún, también se ha observado que la velocidad con respecto al impulsor es estacionaria (ver Zalc [34]). Esto quiere decir, que si consideramos el campo de velocidades en un marco rotario con velocidad ω , las velocidades son

²Véase Lamberto [20].



Figura 5.3: Condición inicial del experimento de visualización (Lamberto *et al.* [20]).

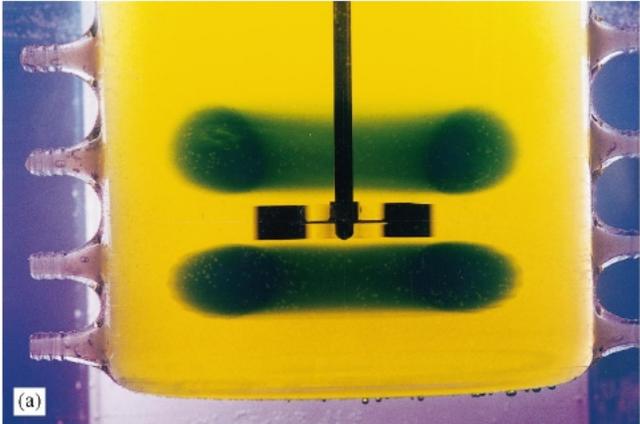


Figura 5.4: Experimento de visualización. Zonas segregadas (Lamberto *et al.* [20]).

estacionarias y podemos eliminar el tiempo. Entonces, empleamos las ecuaciones estacionarias de Navier-Stokes en un marco rotatorio (2.15) como modelo del sistema:

$$\begin{aligned}
 -\nu \nabla^2 w_x + \vec{w} \cdot \nabla w_x - 2\omega w_y + \frac{\partial p}{\partial x} &= -\omega^2 x \\
 -\nu \nabla^2 w_y + \vec{w} \cdot \nabla w_y + 2\omega w_x + \frac{\partial p}{\partial y} &= -\omega^2 y \\
 -\nu \nabla^2 w_z + \vec{w} \cdot \nabla w_z + \frac{\partial p}{\partial z} &= 0 \\
 \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} &= 0.
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Donde \vec{w} es la velocidad con respecto al impulsor. Para recuperar el campo de velocidad \vec{u} con respecto al marco de referencia fijo se emplea la ecuación (2.14)

$$\vec{u} = \vec{w} + \omega \mathbf{k} \times \vec{r}. \tag{5.2}$$

Donde \vec{r} es el vector posición, esto es, $\vec{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$. Las condiciones de frontera con respecto al impulsor son:

- (a) en las paredes del tanque $\vec{w} = -\omega \mathbf{k} \times \vec{r}$,
- (b) en la parte superior del tanque $w_z = 0$,
- (c) en el impulsor $\vec{w} = \vec{0}$.

Obsérvese que la condición de frontera (a) resulta de que el impulsor se mueve en sentido contrario a las manecillas de reloj, visto desde el marco de referencia fijo. En cambio, desde el marco rotatorio, las paredes del tanque giran en sentido a las manecillas de reloj, véase la figura (5.5).

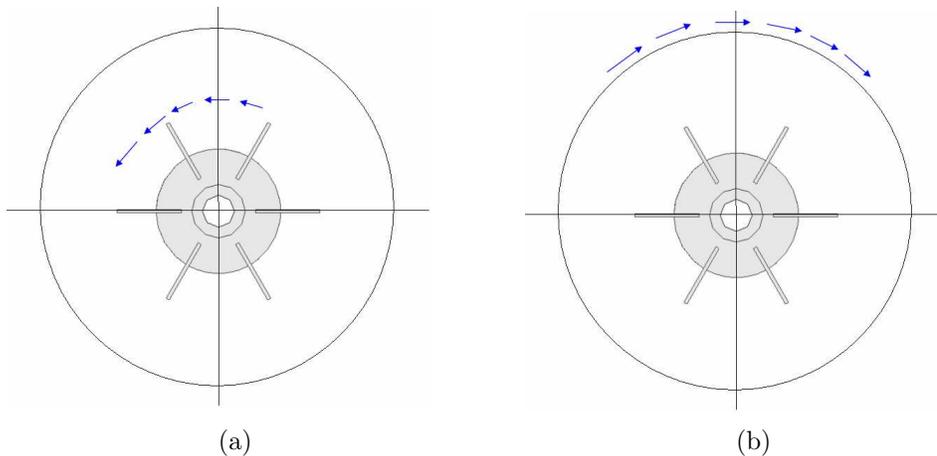


Figura 5.5: Condiciones de Frontera: (a) marco de referencia fijo; (b) marco de referencia móvil.

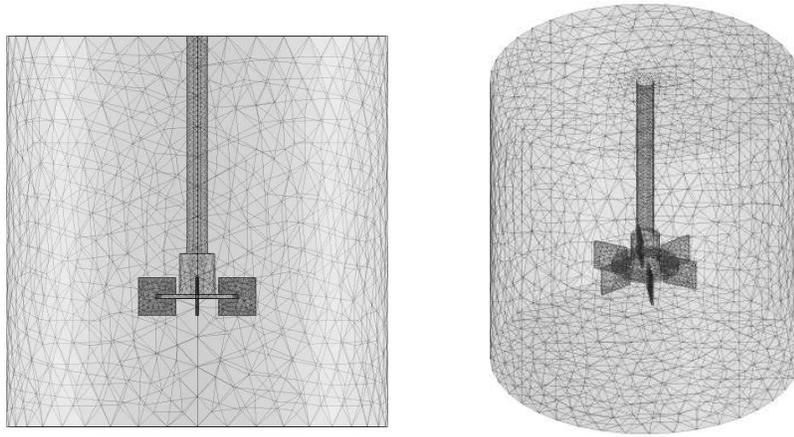


Figura 5.6: Discretización en tetraedros.

5.3. Simulación por el Método del Elemento Finito

Para esta simulación en 3D, se empleó el *software* comercial *Comsol Multiphysics*³, el cual resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes (5.1) por medio del elemento finito. Primero se discretizó el dominio en tetraedros (ver figura 5.6). La discretización contiene 80,835 elementos y 360,982 vértices.

Se procede a resolver las ecuaciones. Es importante mencionar que el *software Comsol Multiphysics* utiliza el método de Newton, en el que cada iteración tardó aproximadamente 20 minutos en una computadora con procesador Intel Core 2 Duo a 1.8 GHz y memoria de 2 GB. El tiempo total para obtener una convergencia de 1.0×10^{-5} fue de aproximadamente 3:30 h. La figura (5.7) muestra el campo de velocidades para el plano tangencial con $\theta = 0$. Se observa que existe simetría con respecto al plano vertical; existen dos vórtices simétricos superiores y dos vórtices simétricos inferiores. Esto concuerda cualitativamente con los resultados de la visualización experimental, esto es, los vórtices simétricos superiores representan la intersección de un plano con un toro, y de igual forma los vórtices simétricos inferiores. También se observa que la velocidad decrece lejos del impulsor, y por lo tanto se crean las zonas segregadas, donde la velocidad es cercana a cero, con lo cual el mezclado es ineficiente. En la figura (5.8) se muestran las líneas de flujo.

³www.comsol.com

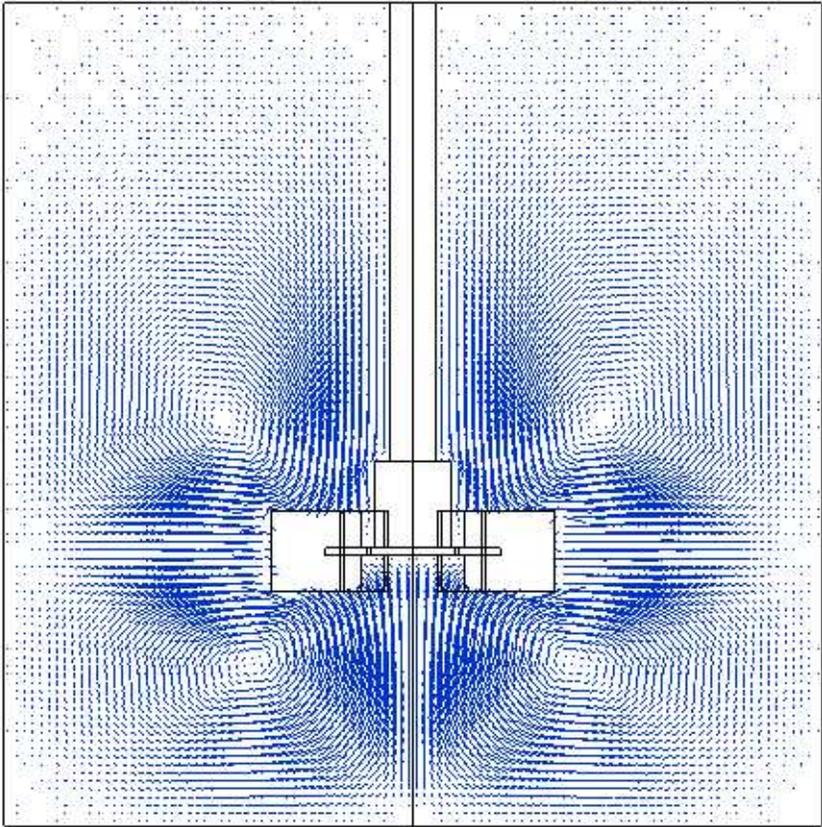


Figura 5.7: Campo de velocidades obtenidas por FEM.

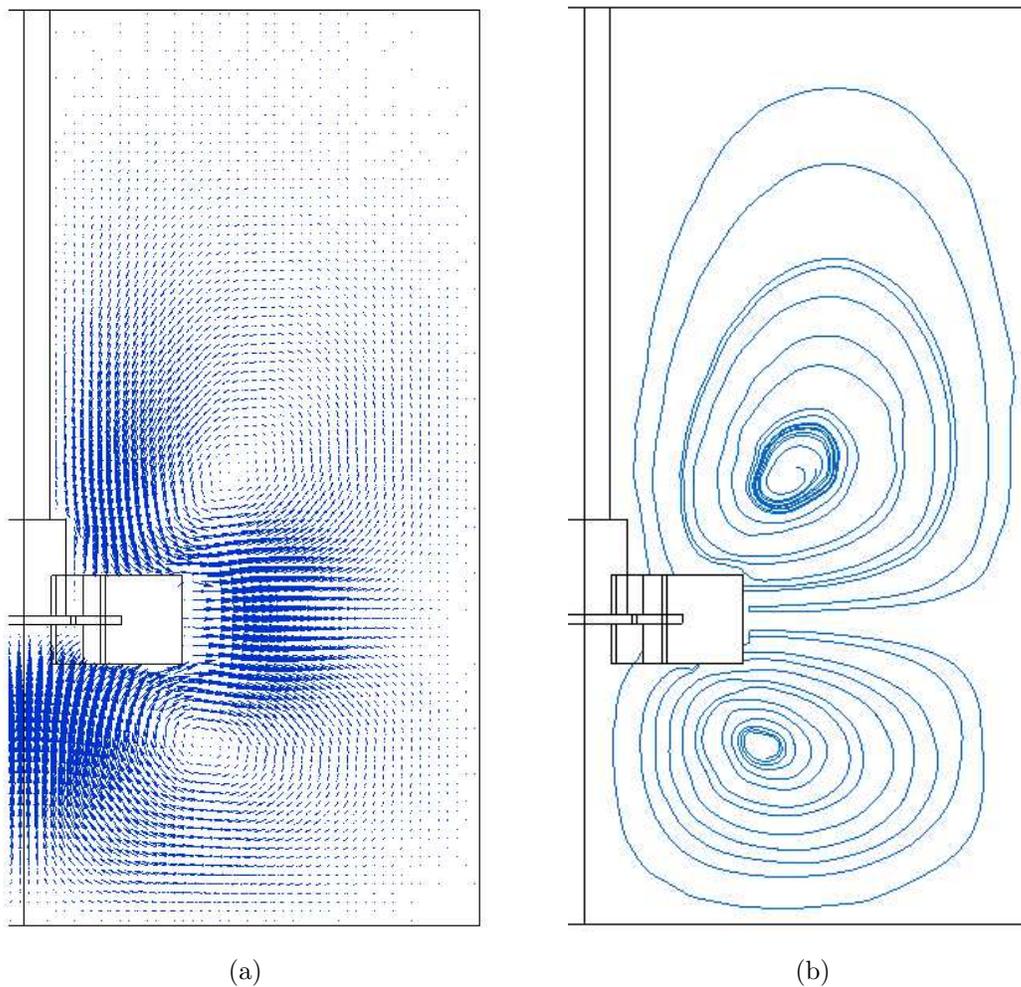


Figura 5.8: Resultados obtenidos por FEM: (a) campo de velocidades; (b) líneas de flujo.

5.4. PIV y Validación de Resultados

Para validar los resultados numéricos obtenidos por una simulación, es necesario obtener información cuantitativa del experimento físico. Para ello se incurre a la técnica de velocimetría de partículas por imágenes (PIV por sus siglas en inglés), la cual es una técnica experimental no intrusiva. La técnica hace visible el movimiento del fluido introduciendo pequeñas partículas que reflejan la luz producida por un láser. Si dos imágenes son obtenidas (por medio de una cámara) con un tiempo de separación corto entre ellas, es posible deducir la velocidad de cada partícula en el flujo,⁴ obteniendo así un campo de velocidades. La figura (5.9) ilustra el montaje experimental de PIV, y la figura (5.10) muestra un campo de velocidades obtenido por esta técnica⁵. Es importante mencionar que cierta luz producida por el láser puede ser reflejada por las hélices del impulsor, por consiguiente; las medidas de velocidad cerca del impulsor deben ser filtradas, sin embargo, no es posible eliminar este problema completamente.

⁴Por medio de la transformada rápida de Fourier [20].

⁵Véase [13].

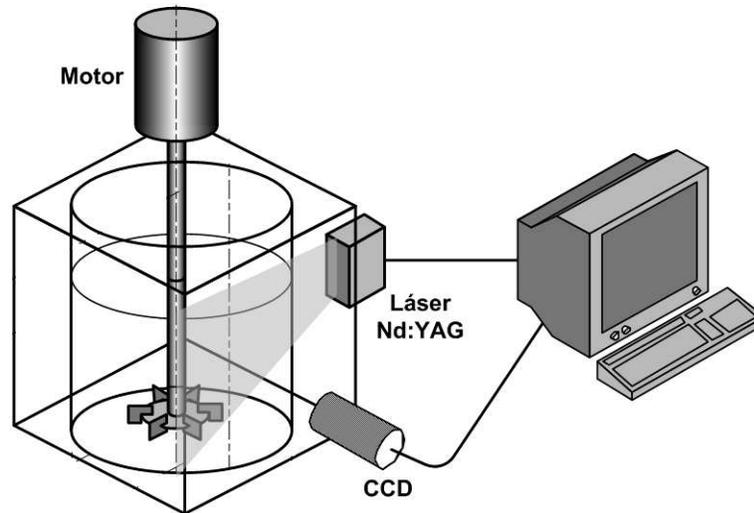


Figura 5.9: Montaje experimental de PIV.

El proceso de validación consiste en construir funciones de densidad de probabilidad para cada componente de velocidad \vec{u} para cierto número de puntos, tanto para los resultados obtenidos de PIV (u_{PIV}), como para los resultados numéricos obtenidos por FEM (u_{FEM}). De esta manera, es posible obtener medidas de discrepancia entre las densidades de la simulación y la de PIV. Una medida común es el promedio la suma de la diferencias al cuadrado (RMS por sus siglas en inglés):

$$RMS = \frac{\left[\frac{1}{i} \sum_1^i (u_{FEM} - u_{PIV})^2 \right]^{1/2}}{\left[\frac{1}{i} \sum_1^i (u_{PIV})^2 \right]^{1/2}} \quad (5.3)$$

La figura (5.10) muestra el campo de velocidades en el primer cuadrante del plano XZ, obtenidos por PIV y por FEM para una comparación. Véase Lamberto *et al.* [20] y Arratia *et al.* [2] para profundizar sobre el tema de validación de resultados.

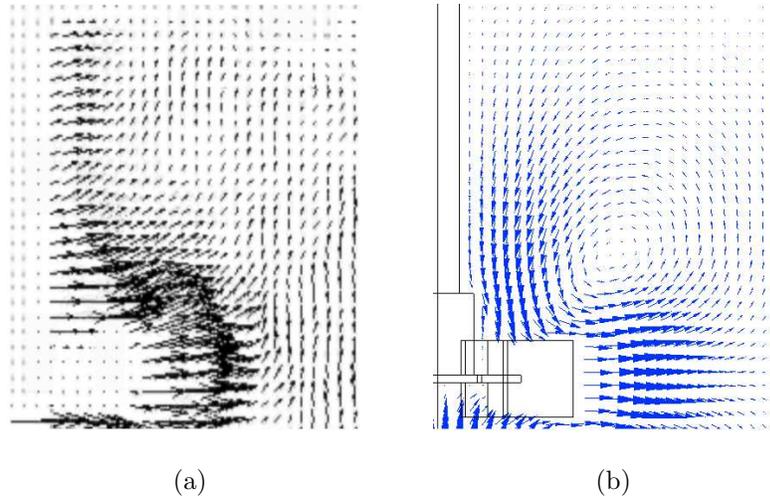


Figura 5.10: Campo de velocidades, primer cuadrante XZ: (a) obtenidos por PIV; (b) obtenidos por FEM.

5.5. Conclusiones

El método del elemento finito puede generar buenos resultados para la simulación en tanques agitados. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, la principal desventaja de la simulación es el tiempo de cómputo para resolver los sistemas lineales (matrices) y no lineales. En esta tesis se presentó el método de Newton porque es uno de los métodos más robustos y porque el *software Comsol Multiphysics* lo usa. Pero, existen métodos más rápidos que el de Newton para problemas mixtos (ecuaciones de Stokes y Navier-Stokes), como es el método de Uzawa (ver [11] y [28]), que incluso se ha aplicado a problemas de mezclado (ver Bertrand *et al.* [5]). También para lograr menos tiempo de cómputo, existen métodos más recientes que emplean otras formulaciones de FEM, como los métodos de dominio ficticio (ver Rivera *et al.* [27]).

Una de las ventajas de usar un *software* comercial, es que comúnmente están programados para resolver gran variedad de problemas comunes en ingeniería, sin embargo, para problemas de investigación no es el caso. Por ejemplo, simular el mezclado en fluidos no newtonianos⁶ utilizando *Comsol Multiphysics*, puede llevar a cálculos infinitos. Esto se debe a la alta no linealidad de las ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales al ser discretizadas con la formulación tradicional de FEM, conlleva a un método que puede diverger. De aquí, que es necesario tener flexibilidad sobre los métodos numéricos y formulaciones de FEM que se utilizan en un *software* comercial.

Por otra parte, también existen a la venta bibliotecas de FEM⁷ en lenguajes de programación para extender su funcionalidad, sin embargo, el precio de este tipo de software es muy elevado. Así, que es indispensable programas de apoyo para desarrollar librerías de programación en FEM en instituciones de investigación en computación científica, y cuyo uso sea libre y abierto.

⁶Fluidos con viscosidad variable.

⁷www.diffpack.com .

Bibliografía

- [1] M. Alvarez, P.E. Arratia y F.J. Muzzio, *Laminar Mixing in Eccentric Stirred Tank Systems*, Canadian Journal of Chemical Engineering, **80**, 546 (2002).
- [2] P. E. Arratia, J. Kukura, J. Lacombe y F.J. Muzzio, *Mixing of Shear-Thinning Fluids with Yield Stress in Stirred Tanks*, AIChE Journal, **52**, 2310 (2006).
- [3] G. Ascanio, M. Brito-Bazán, E. Brito De La Fuente, P.J. Carreau y P.A. Tanguy, *Unconventional Configuration Studies to Improve Mixing Times in Stirred Tanks*, Canadian Journal of Chemical Engineering, **80**, 558 (2002).
- [4] G.K. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics* (Cambridge University Press, 2000).
- [5] F. Bertrand, P. Tanguy y F. Thibault, *Adaptative Finite Element Simulations of Fluid Flow in Twin-Screw Extruders*, Computers & Chemical Engineering, **27**, 491 (2003).
- [6] A.I. Borisenko y I.E. Tarapov, *Vector and Tensor Analysis with Applications* (Dover, New York, 1979).
- [7] J.W. Brown, R.V. Churchill *Fourier Series and Boundary Value Problems, Sixth edition* (McGraw-Hill, 2001).
- [8] R. L. Burden y J.D. Faires, *Análisis Numérico, 6ª edición* (Editores International Thomson).
- [9] G.F. Carey, *Computational Grids: Generations, Adaptation & Solution Strategies* (TF-CRC 1997).
- [10] H. Elman, D. Silvester y A. Wathen, *Finite Elements and Iterative Solvers* (Oxford University Press, New York 2005).
- [11] M. Fortin y R. Glowinski, *The Augmented Lagrangian Method* (North Holland, Amsterdam 1983).
- [12] J.C. Heinrich y D.W. Pepper, *The Intermediate Finite Element Method: Fluid Flow and Heat Transfer Applications* (Taylor & Francis, 1999).
- [13] J.C. Hernandez Maya, *Mezclado en Estado No Estable de Fluidos Newtonianos* (Tesis de licenciatura, UNAM, 2007)

- [14] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol. I* (John Wiley and Sons, New York, 1988).
- [15] T.J.R. Hughes, *The Finite Element Method* (Dover, New York, 2000).
- [16] U. Ghia, K.N. Ghia y C.T Shin, *High Resolution for Incompressible Flow using the Navier-Stokes Equations and Multigrid Method*, Journal of Computational Physics **48**, 387 (1982).
- [17] P.M. Gresho y R.L. Sani, *Incompressible Flow and the Finite Element Method, Vol. I. Advection-Diffusion*. (John Wiley & Sons, 1998).
- [18] P.M. Gresho y R.L. Sani, *Incompressible Flow and the Finite Element Method, Vol. II. Isothermal Laminar Flow*. (John Wiley & Sons, 1998).
- [19] D.J. Lamberto, F.J. Muzzio, P.D. Swanson y A.L. Tonkovich, *Using Time-Dependent RPM to Enhance Mixing in Stirred Vessels*, Chemical Engineering Science. **51**, 733-741 (1996).
- [20] D.J. Lamberto, M.M. Alvarez y F.J. Muzzio, *Experimental and Computational Investigation of the Laminar Flow Structure in a Stirred Tank*, Chemical Engineering Science. **54**, 919-942 (1999).
- [21] J.T. Oden y G.F. Carey, *Finite Elements: A Second Course, Vol II* (Prentice-Hall, 1983).
- [22] J.T. Oden y G.F. Carey, *Finite Elements: Mathematical Aspects, Vol IV* (Prentice-Hall, 1983).
- [23] J.T. Oden y J.N. Reddy, *An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements* (Wiley-Interscience, 1982).
- [24] J.M. Ottino, *The Kinematics of Mixing* (Cambridge University Press, UK, 1989).
- [25] J.N. Reddy, *Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering* (McGraw Hill, New York 1986).
- [26] J.N. Reddy, *An Introduction to the Finite Element Method, Second Edition* (McGraw Hill, New York 1993).
- [27] C. Rivera, M. Heniche, G. Ascanio y P. Tanguy, *A Virtual Finite Element Model for Centered and Eccentric Mixer Configurations*, Computers & Chemical Engineering. **28**, 2459-2468 (2004).
- [28] M. P. Robichaud, P. Tanguy y M. Fortin, *An Iterative Implementation of the Uzawa Algorithm for 3-D Fluid Flow Problems*, International Journal for Numerical Methods in Fluids. **10**, 429-442 (1990).
- [29] Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (PWS Publishing Company, 1995).
- [30] H. Schlichting y K. Gersten, *Boundary Layer Theory* (8th Edition, Springer Verlag, 2000).

- [31] G.B. Tatterson, *Fluid Mixing and Gas Dispersion in Agitated Tanks* (McGraw-Hill, New York, 1991).
- [32] H.K. Versteeg y W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics* (Prentice Hall, 1995).
- [33] F.M. White, *Viscous Fluid Flow, Second Edition* (McGraw-Hill, 1991).
- [34] J.M.Zalc, M.M. Alvarez, T. Shinbrot, B.E. Arik y F.J. Muzzio, *Extensive Validation of Computed Laminar Flow in a Stirred Tank with Three Rushton Turbines*, *AIChE Journal*, **47**, 2144 (2001).